



Уральский  
федеральный  
университет

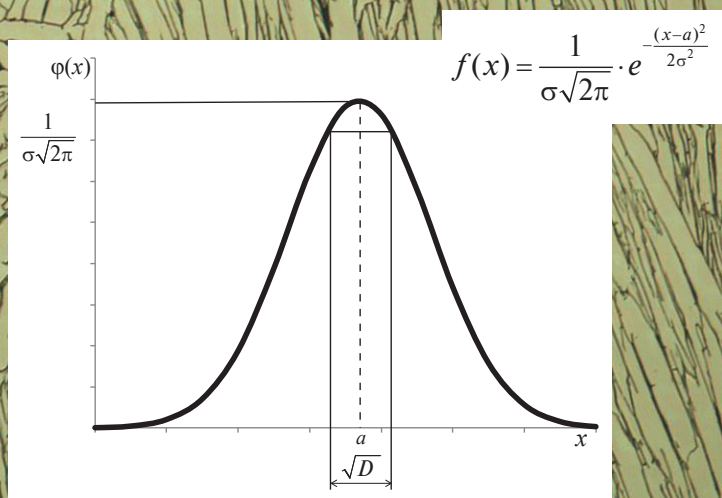
имени первого Президента  
России Б.Н.Ельцина

Институт новых материалов  
и технологий

Ю. В. ЮДИН  
М. В. МАЙСУРАДЗЕ  
Ф. В. ВОДОЛАЗСКИЙ

# ОРГАНИЗАЦИЯ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Учебное пособие



100 мкм



Министерство науки и высшего образования  
Российской Федерации  
Уральский федеральный университет  
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

**Ю. В. Юдин, М. В. Майсурадзе, Ф. В. Водолазский**

# **ОРГАНИЗАЦИЯ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА**

Учебное пособие

Рекомендовано методическим советом  
Уральского федерального университета  
для студентов вуза, обучающихся  
по направлению подготовки  
22.03.01 — Материаловедение и технология материалов

Екатеринбург  
Издательство Уральского университета  
2018

УДК 519.2(075.8)

ББК 22.172я73

Ю16

Рецензенты:

завкафедрой технологии металлов доц., канд. техн. наук *В. В. Илюшин*, проф., д-р техн. наук *Б. А. Потехин* (Уральский государственный лесотехнический университет);

завлабораторией металлургических процессов, ст. науч. сотр., канд. техн. наук *С. М. Битюков* (ОАО «РосНИТИ»)

Научный редактор — проф., д-р техн. наук А. А. Попов

**Юдин, Ю. В.**

Ю16 Организация и математическое планирование эксперимента : учебное пособие / Ю. В. Юдин, М. В. Майсурадзе, Ф. В. Водолазский. — Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2018. — 124 с.

ISBN 978-5-7996-2486-6

В учебном пособии подробно и доступно рассмотрены вопросы организации, математического планирования и обработки результатов металлургического эксперимента. Материал содержит наглядные примеры, касающиеся проведения исследований в производственных и лабораторных условиях, поиска оптимальных режимов технологических процессов, обработки результатов экспериментов.

Пособие предназначено для бакалавров и магистров студентов высших учебных заведений.

Библиогр.: 8 назв. Табл. 5. Рис. 25.

УДК 519.2(075.8)

ББК 22.172я73

ISBN 978-5-7996-2486-6

© Уральский федеральный  
университет, 2018

# Оглавление

---

Введение.....	5
---------------	---

<b>Глава 1. Основные сведения о теории вероятностей и математической статистике .....</b>	<b>8</b>
---	----------

Основные определения теории вероятностей и математической статистики .....	8
Функции распределения случайной величины .....	13
Моменты функции распределения .....	17
Нормальный закон распределения .....	18
Вариационный ряд и его характеристики .....	21
Законы распределения .....	28
Надежность оценки математического ожидания и среднеквадратичного отклонения.....	30
Первичная обработка результатов эксперимента .....	32
Табличное представление данных .....	34
Графическое представление эмпирических распределений .....	36
Критерии значимости.....	39
Критерии согласия .....	41

<b>Глава 2. Корреляционный и регрессионный анализ.....</b>	<b>44</b>
--	-----------

Основные понятия.....	44
Основные допущения регрессионного анализа .....	46
Определение коэффициентов уравнения регрессии.....	48
Основные допущения корреляционного анализа .....	53
Определение выборочного коэффициента корреляции ....	54
Интерпретация коэффициента корреляции .....	55
Надежность определения коэффициента корреляции .....	56
Использование коэффициента корреляции для расчета коэффициентов линейного уравнения вида $y = ax + b$ .....	58
Множественная корреляция .....	59

<b>Глава 3. Основы теории ошибок .....</b>	<b>63</b>
Основные сведения о единицах физических величин .....	63
Виды измерений и погрешностей .....	67
Закон сложения случайных погрешностей.....	70
Погрешности косвенных измерений .....	74
Учет систематических и случайных погрешностей.....	75
 <b>Глава 4. Математическое планирование эксперимента .....</b>	 <b>77</b>
Основные виды экспериментальных исследований .....	77
Поиск оптимальных условий .....	79
Факторы и параметры оптимизации .....	80
Постановка задачи при планировании эксперимента .....	85
Построение таблицы условий проведения экспериментов .....	88
Полный факторный эксперимент (ПФЭ) .....	89
Основные свойства матрицы планирования ПФЭ .....	90
Таблица условий проведения эксперимента .....	92
Определение коэффициентов модели в ПФЭ.....	92
Дробный факторный эксперимент .....	94
Оптимизация объектов исследования поисковыми методами .....	97
Оптимизация многофакторных объектов.....	100
Особенности оптимизации объектов при наличии нескольких экстремумов .....	109
Общие представления о планах второго порядка.....	110
Симметричные композиционные ортогональные планы.....	112
 <b>Библиографический список.....</b>	 <b>121</b>

## Введение

---

**Н**астоящий курс возник в результате необходимости проведения исследований в производственных условиях на крупногабаритных металлургических агрегатах, поиска оптимальных режимов технологических процессов. Проведение многочисленных экспериментов зачастую невозможно осуществлять в заводских условиях вследствие того, что исследования являются весьма дорогостоящими и требуют больших затрат времени. Примерами таких экспериментов могут служить разработка режимов окончательной термической обработки крупногабаритных деталей массой 150...300 т, подбор рациональных технологий поверхностного упрочнения металлических изделий на установках ионного имплантирования химических элементов.

*Организация эксперимента* — это наука о статистических методах обработки результатов экспериментов и о способах планирования научного и технологического эксперимента, а также о методах организации труда при планировании экспериментов.

Поиск решений проблем современного металловедения и термической обработки связан с научной организацией эксперимента, с глубоким пониманием методов, позволяющих улучшить эффективность научных исследований, решить задачи оптимизации технологических процессов.

Существенное влияние на выбор варианта общей методики научного исследования оказывает тип исследуемого объекта. В зависимости от объема установленной закономерности об исследуемом объекте различают следующие его типы:

1) «прозрачный ящик» — объекты, у которых внутренние причинно-следственные связи и их математическое описание в основном известны, и задача исследования такого объекта состоит в том, чтобы уточнить лишь отдельные частные закономерности, которые проявляются при некотором изменении технологического процесса или состава вещества. Раскрытие исследуемой закономерности «прозрачного ящика» производят на основе приложения конкретных наук, таких как теория металлургии, теплофизика, металлография и другие науки, выбор которых следует из природы объекта и цели исследования;

2) «черный ящик» — объекты, у которых причинно-следственные связи между входами и выходами по крайней мере на момент исследования неизвестны. Когда число действующих факторов велико и большинство из них оказывается величинами, включающими случайные компоненты, тогда для обработки результатов исследования и получения математической модели в виде уравнения регрессии применяют формально-статистические методы, основанные на применении законов теории вероятностей, теории ошибок, математической статистики, регрессионного и корреляционного анализа, планирования эксперимента.

Рассмотрим для примера «черный ящик» — необходимо максимально увеличить относительное удлинение железоникелевого сплава, изменяя содержание никеля и железа, а также параметры термообработки (температуру нагрева и скорость охлаждения). Схема проведения экспериментов представлена на рисунке.



Схема проведения экспериментов по оптимизации пластических свойств железоникелевого сплава



После проведения ряда экспериментов и обработки их результатов можно построить зависимость вида  $\delta = f(\text{Fe}, \text{Ni}, t, \nu)$ . При этом функциональный вид зависимости может быть выбран произвольно, если заранее не наложены определенные ограничения.

Нередки случаи, когда результаты физического исследования объекта, целиком подпадающего под действие известных законов, достаточно сильно отличаются от теоретических. Это может быть обусловлено тем, что имеется неизвестный фактор, радикально изменяющий результаты эксперимента, и в данном случае следует применить формально-статистические методы обработки результатов измерений для выявления воздействующего фактора.

# ГЛАВА 1.

## Основные сведения о теории вероятностей и математической статистике

---

### Основные определения теории вероятностей и математической статистики

---

**П**остановка экспериментальной работы может быть подчинена решению множества задач. Одной из задач является экспериментальное исследование определенного параметра какого-либо процесса. Исследователя интересует однозначность определяемого параметра, т. е. среднее значение и поле рассеивания результатов. В ряде случаев исследователь может искать вид функциональной зависимости изучаемого параметра от величины воздействия. Несколько иная задача может быть при отыскании численных значений коэффициентов заранее известной аналитической зависимости по результатам проведенных экспериментов. Иногда требуется установить вид связи определенных независимых величин с результатами эксперимента, когда априорно данная зависимость неизвестна. Все эти задачи решаются путем статистической обработки эмпирических данных с помощью аппарата математической статистики, основанной на теории вероятностей.

*Испытанием*, или *опытом*, называется реализация некоторых условий. Явление, получающееся в результате испытания, называется *событием*. События делятся:

- 1) на достоверные (обязательно произойдут);
- 2) невозможные (не произойдут никогда);
- 3) случайные, или возможные (могут произойти с некоторой долей вероятности);
- 4) совместные (при испытании появление одного из событий не исключает появления другого). Два события называются несовместными, если при появлении одного из них исключается появление другого;
- 5) единственно возможные — такие события, когда при испытании произойдет хотя бы одно из них;
- 6) равновозможные — когда несколько исходов имеют возможность появления.

*Вероятностью события  $A$*  называется отношение случаев  $m$  к общему числу  $N$  всех равновозможных, несовместных, единственно возможных событий и определяется по формуле (1.1)

$$P(A) = m/N. \quad (1.1)$$

Вероятность различных событий можно подразделить на следующие:

- 1) вероятность достоверного события равна 1;
- 2) вероятность невозможного события равна 0;
- 3) вероятность возможного события находится в интервале  $[0; 1]$ ;
- 4) сумма вероятностей противоположных событий равна 1.

Из реальных опытов получаем относительную частоту (относительную частоту) — отношение данного конкретного события к общему числу испытаний, т. е. вероятность может быть определена априорно, заранее, а относительная частота — только экспериментально.

При одинаковых условиях опытов относительная частота есть величина устойчивая, колеблющаяся около некоторого постоянного числа.

**Пример.** Английский математик, статистик, биолог Карл (Чарлз) Пирсон (англ. Karl (Charles) Pearson) (27 марта 1857 — 27 апреля 1936) побрасывал монету несколько десятков тысяч раз. Данные он свел в таблицу (табл. 1.1), в которой  $N$  — общее количество бросаний,  $m$  — количество (частота) выпадений аверса (реверса) монеты.

Таблица 1.1

**Зависимость относительной частоты выпадения заданной стороны монеты  $P$  от общего числа событий  $N$**

$P$	$N$	$m$
0,5069	4040	2048
0,5015	12 000	6019
0,5005	24 000	12 012

Из табл. 1.1 видно, что вероятность проявляется тем точнее, чем больше число реализаций из некоторой совокупности, создающее множество значений какого-либо явления.

При переходе от реального явления к модели требуется подтверждение выдвинутой гипотезы. Под *гипотезой* понимается любое допущение, поддающееся экспериментальной проверке.

*Генеральная совокупность* — бесконечное множество реальных и мыслимых значений какого-либо явления. Конечное число событий из генеральной совокупности образует *выборочную совокупность*, или *выборку*, содержащую  $N$  элементов (рис. 1.1).

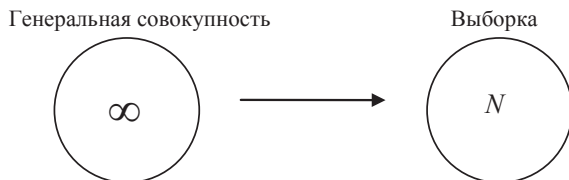


Рис. 1.1. Схема соотношения генеральной совокупности и выборочной совокупности объемом  $N$

Требования, предъявляемые к выборке:

- 1) отбор из генеральной совокупности должен быть произведен случайным образом;
- 2) выборка должна достаточно полно характеризовать генеральную совокупность и обладать свойством репрезентативности (представительности). Это требование налагает определенные ограничения на объем выборки. Число значений в выборке ( $N$ ) должно быть не менее критического ( $N_{\text{крит}}$ ), которое определяется доверительной вероятностью основных статистических значений параметров генеральной совокупности;
- 3) выборка должна быть независимой. Это требование предполагает независимость выборки от внешних условий (температура, давление, время суток и т. д.), а также от квалификации оператора, производящего измерения.

*Случайная величина* — такая величина, которая в условиях эксперимента может принимать ряд значений в заданном интервале. В математической статистике различают непрерывные и дискретные случайные величины (рис. 1.2).

Непрерывная случайная величина может быть представлена на конечном или бесконечном отрезке. Она может принимать в интервале распределения вероятностей любые значения в пределах  $0 \dots 1$ . Дискретная случайная величина принимает заранее определенные значения на отрезке.

Всякую непрерывную случайную величину можно представить в виде дискретной случайной величины, разбив ее на определенные интервалы и задав величину вероятности появления этих интервалов. В физических экспериментах, как правило, имеют дело с дискретными случайными величинами, определяемыми шагом  $\Delta x_i$  и  $\Delta y_i$  по осям  $X$  и  $Y$ , количеством попаданий в заранее выбранные интервалы  $\Delta x_i$  и  $\Delta y_i$  и ограниченными точностью измерительных приборов.

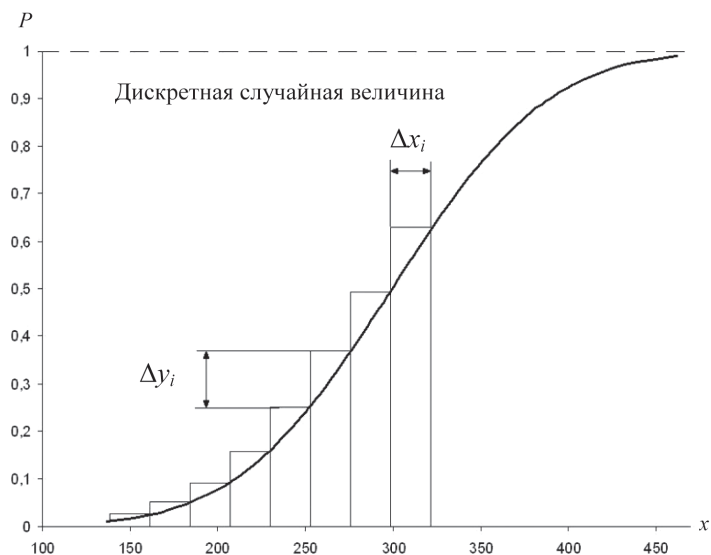


Рис. 1.2. Непрерывная (а) и дискретная (б) случайные величины

## Функции распределения случайной величины

Случайная величина представляется в виде функции распределения, которая бывает двух видов — интегральная и дифференциальная.

*Интегральная функция распределения* характеризует вероятность появления значения непрерывной случайной величины в интервале меньше значения  $x_k$

$$F(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x') dx = p(x' \leq x).$$

Для дискретной случайной величины  $F(x_k) = \sum_{i=1}^n P_i < 1, k < n$ .

**Пример.** Для интегральной функции распределения вероятность выпадения любых трех граней кубика составит  $F(x_3) = P_1 + P_2 + P_3 = 1/2 < 1$ .

При любом виде функции распределения непрерывной случайной величины интегральная функция распределения (рис. 1.3) имеет общие свойства:

- 1) функция является монотонной;
- 2) функция асимптотически стремится к 1, т.е. функция неубывающая.

Функция интегрального распределения случайной величины характеризует вероятность появления того или иного значения случайной величины. Если случайная величина дискретна, то функцию распределения можно представить в виде

$X$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	...	$x_n$
$P$	$p_1$	$p_2$	$p_3$	...	$p_n$

Здесь  $X$  — значение случайной величины;  $P$  — вероятность появления того или иного значения случайной величины  $X$ . При этом дискретная случайная величина  $X$  принимает  $n$  значений.

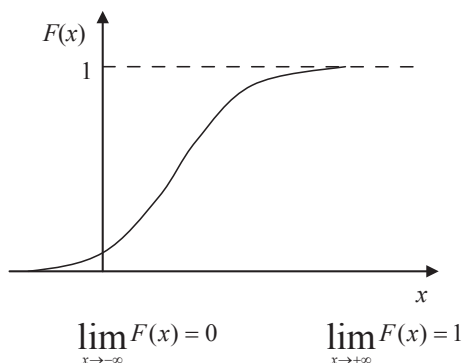


Рис. 1.3. Интегральная функция распределения вероятности  $F(x)$  случайной величины  $x$

**Пример.** Графически интегральную функцию распределения можно представить в следующем виде. Если вероятность выпадения одной из граней кубика составляет  $1/6$ , то при достаточном объеме выборки интегральная функция распределения вероятности может быть графиком, представленным на рис. 1.4.

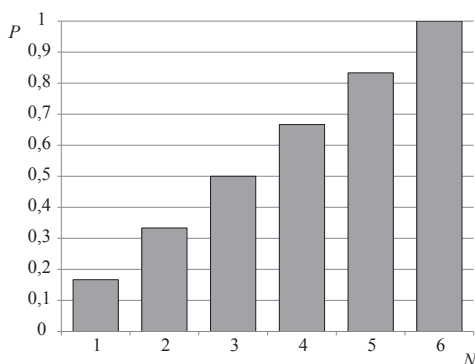


Рис. 1.4. Интегральная функция распределения вероятности выпадения заданной грани кубика



Производная от  $F(x)$  по  $x$  называется *функцией плотности распределения вероятности*, или *дифференциальным законом распределения*, и определяется согласно формуле (1.2) как предел отношения вероятности того, что случайная величина  $X$  примет значение от  $F(x)$  до  $F(x + dx)$ , к величине интервала  $dx$

$$\varphi(x) = \frac{dF(x)}{dx}. \quad (1.2)$$

Геометрически это можно показать следующим образом. На рис. 1.5 приведен график функции распределения плотности вероятности  $\varphi(x)$  случайной величины  $x$ . При малом изменении конкретной величины  $x_0$  на значение  $\pm \delta/2$ , вероятность появления данного значения  $x_0 \pm \delta/2$  будет определяться по формуле (1.3)

$$P(x_0) = \delta \varphi(x_0). \quad (1.3)$$

Вероятность появления значения случайной величины  $X$  из интервала  $\pm \delta/2$  вблизи значения  $x_0$  равняется площади выделенного прямоугольника (рис. 1.5).

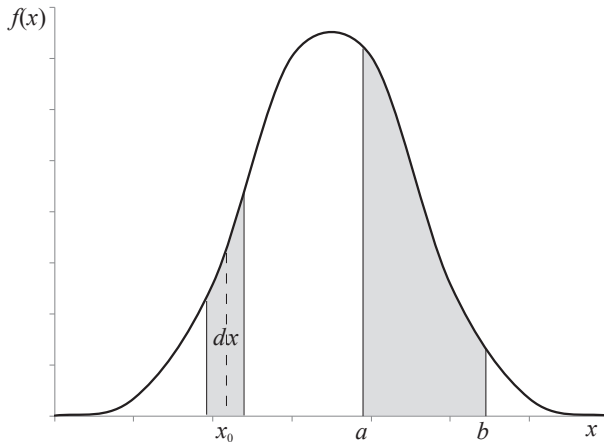


Рис. 1.5. Определение вероятности события  $P$  по функции плотности распределения вероятности  $\varphi(x)$

В случае существенного изменения величины  $x$ , например в интервале от  $a$  до  $b$ , для определения вероятности появления таких значений  $X$  следует вычислить определенный интеграл вида

$$P(a, b) = \int_a^b \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right) dx. \quad (1.4)$$

На рис. 1.5 величина вероятности  $P(a, b)$  в формуле (1.4) равна площади заштрихованной фигуры.

Дифференциальный закон распределения имеет ряд свойств:

- 1) плотность распределения — величина неотрицательная, т. к. интегральная функция распределения — величина неубывающая;
- 2) несобственный интеграл от плотности распределения согласно формуле (1.5) равен 1

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) dx = 1; \quad (1.5)$$

- 3) из второго свойства вытекает правило нормировки — формулы (1.6)–(1.7):
  - для дискретной случайной величины сумма всех вероятностей должна равняться 1

$$\sum_{i=1}^n P_i = 1; \quad (1.6)$$

- для непрерывной случайной величины, изменяющейся на конечном или бесконечном интервале, интеграл от функции плотности распределения должен быть равен 1

$$\int \varphi(x) dx = 1. \quad (1.7)$$

## Моменты функции распределения

Функция распределения является универсальным способом описания случайной погрешности. Однако чтобы получить функцию распределения, в ряде случаев необходимы трудоемкие исследования и расчеты. Поэтому на практике часто используются характеристики распределения вероятности, называемые *моментами*.

1. Момент первого порядка (математическое ожидание).

Величина математического ожидания определяется выражением (1.8)

$$M_x = \bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x\varphi(x)dx. \quad (1.8)$$

Эта величина соответствует среднему значению случайной величины.

Для дискретной случайной величины момент первого порядка определяется по формуле (1.9)

$$M_x = \bar{x} = \sum_{i=1}^n x_i P_i. \quad (1.9)$$

2. Момент второго порядка (дисперсия случайной величины).

Момент второго порядка, или дисперсия случайной величины, определяется по формуле (1.10)

$$M_2 = D_x = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x})^2 f(x)dx. \quad (1.10)$$

Все остальные моменты выводятся по аналогии с моментом второго порядка согласно формуле (1.11)

$$M_k = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x})^k f(x)dx; \quad k = 2, 3, 4, \dots \quad (1.11)$$

На рис. 1.6 приведен график распределения плотности вероятности, характеризующий геометрический смысл математического ожидания. Здесь  $M_x$  — центр тяжести кривой;  $D_x$  — средний вероятностный интервал разброса значений  $x$  в окрестности точки  $M_x$ .

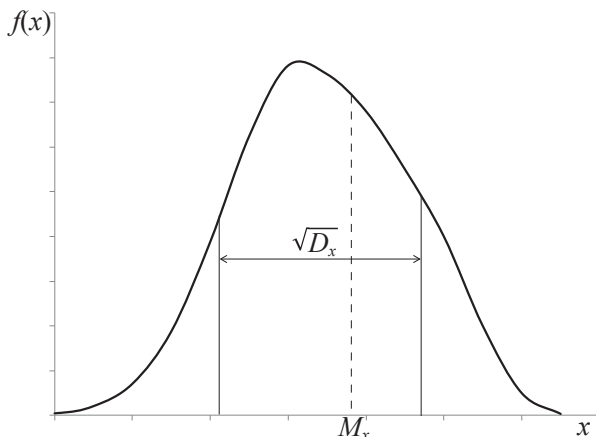


Рис. 1.6. Соотношение величин  $M_x$  и  $\sqrt{D_x}$  на графике распределения плотности вероятности

## Нормальный закон распределения

В подавляющем числе случаев в практических расчетах предполагается, что случайная величина  $X$  распределена по так называемому нормальному закону (закону Гаусса)

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}}, \quad (1.12)$$

где  $a$  — величина математического ожидания ( $M_x$ );  $\sigma$  — среднеквадратичное отклонение (СКО), характеризующее генеральную совокупность исследуемых случайных величин.

Нормальный закон распределения (1.12) является двухпараметрическим, т. е. зависит от двух параметров — математического ожидания и среднеквадратичного отклонения.

Для конкретной случайной величины  $X$  величины математического ожидания  $a$  и среднеквадратического отклонения  $\sigma$  — независимые фиксируемые константы. Плотность вероятности нормального закона распределения имеет экстремум, величина которого определяется по среднеквадратичному отклонению  $\sigma$  (рис. 1.7).

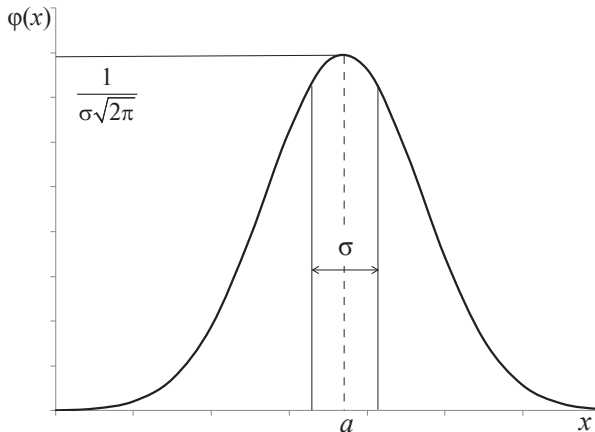


Рис. 1.7. Нормальный закон распределения случайной величины

Величину экстремума функции плотности распределения можно вычислить следующим образом по формулам (1.13)

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi'(x) = 0, \\ \varphi'(x) = \frac{2(x-a)}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right), \\ \varphi_{\max}(a) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}, \\ F(x) = \int \varphi(x) dx = \int \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}\right) dx. \end{array} \right. \quad (1.13)$$

Интеграл относится к «неберущимся», а численное решение может быть найдено путем разложения подынтегральной функции в ряд Тейлора. Впервые функция  $F(x)$  была получена Лапласом, поэтому  $F(x)$  называется функцией Лапласа.

Нормальный закон распределения выведен из следующих предположений:

- 1) ошибки измерения неизбежно сопутствуют любому измерению случайной величины;
- 2) любую ошибку измерения можно представить как совокупность бесконечно большого числа элементарных ошибок;
- 3) элементарные ошибки равномерно входят в каждое измерение как со знаком «плюс», так и со знаком «минус».

Различают нормированную и ненормированную функцию нормального распределения. Нормирование случайной независимой величины проводится по формуле (1.14)

$$U = \frac{x - a}{\sigma}. \quad (1.14)$$

Для генеральной совокупности среднееквадратичное отклонение нормированной случайной величины  $\sigma = 1$ , а величина математического ожидания  $a = 0$ . В таком случае функция плотности вероятности нормированной случайной величины может быть представлена в виде

$$\varphi(U) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{U^2}{2}\right). \quad (1.15)$$

Для нормированной случайной величины (формула (1.15)) функция Лапласа табулирована и приводится в учебниках по теории вероятностей.

## Вариационный ряд и его характеристики

Переходя от генеральной совокупности к выборке, необходимо сделать выборочные оценки математического ожидания и среднеквадратического отклонения.

Введем понятие вариационного ряда. *Вариационным рядом* случайной величины называется упорядоченная последовательность случайных чисел, расположенных в порядке возрастания.

**Пример.** Пусть есть некоторая последовательность экспериментальных значений  
10, 20, 15, 14, 13, 10, 19.  
Вариационный ряд в этом случае будет иметь вид  
10, 10, 13, 14, 15, 19, 20.

Характеристиками вариационного ряда являются медиана, размах, подразмах и мода.

*Медиана* — число, делящее вариационный ряд пополам:  $\text{med}(x) = 14$ . Если количество значений в вариационном ряду четное, то в качестве медианы берется среднее между двумя средними значениями.

*Размах* вариационного ряда — это разность между наибольшим и наименьшим значениями чисел вариационного ряда:  $W_7 = w_7 - w_1 = 20 - 10 = 10$ .

*Подразмах* вариационного ряда — разность между большим и меньшим значениями чисел ряда, исключая наибольшее и наименьшее числа.

*Мода* вариационного ряда — значение случайной величины, которой соответствует наибольшая вероятность (повторяемость) появления:  $\text{mod}(x) = 10$ .

Пусть в выборке объемом  $N$  случайная величина  $x_i$  встречается  $n_i$  раз, тогда  $n_i$  — частота, или частость. Относительная частота ( $n'_i$ ) — это отношение  $n_i/N$ .

Выборочную оценку математического ожидания генеральной совокупности можно сделать двумя способами:

- 1) через среднее арифметическое значение случайной величины по формуле (1.16)

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{N}, \quad (1.16)$$

где  $\sum_{i=1}^n x_i$  — сумма всех членов вариационного ряда;  $N$  — объем выборки;

- 2) через медиану вариационного ряда.

Первый способ наиболее подходит, когда случайная величина распределена по закону близкому к нормальному. Второй способ работает лучше, когда распределение случайной величины описывается несколькими законами распределений и является «засоренным» распределением.

Выборочную оценку среднеквадратичного отклонения генеральной совокупности описывают следующими способами:

- 1) если выполняется нормальный закон распределения, то величину среднеквадратичного отклонения для ряда  $x$  вычисляют по формулам (1.17)–(1.18)

$$\sigma = S_x = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{N-1}} \text{ при } N < 25; \quad (1.17)$$

$$\sigma = S_x = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{N}} \text{ при } N > 25; \quad (1.18)$$

- 2) по интегральной функции распределения (рис. 1.8) согласно формуле (1.19)

$$S = X_{(0,5)} - X_{(0,159)}; \quad (1.19)$$



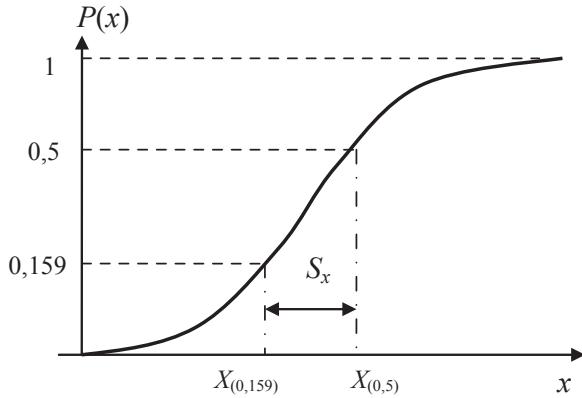


Рис. 1.8. Определение величины среднеквадратичного отклонения по интегральной функции распределения

- 3) через величину размаха вариационного ряда по формуле (1.20)

$$S_x = k_n W, \quad (1.20)$$

где  $k_n$  определяется в зависимости от  $n$

$n$	3	5	7	9
$k_n$	0,59	0,43	0,37	0,34

Вторым и третьим способами вычисления среднеквадратичного отклонения пользуются тогда, когда вид закона распределения заранее неизвестен.

Физически среднеквадратичное отклонение характеризует ошибку измерения, т. е. с увеличением среднеквадратичного отклонения увеличивается ошибка измерения случайной величины. Значение среднеквадратичного отклонения необходимо округлять до одной значащей цифры при числе измерений  $N < 20$ .

**Пример.** Для приведенного выше вариационного ряда рассчитать выборочное среднее и среднеквадратичное отклонение, предполагая:

- 1) полученные экспериментальные результаты подчиняются нормальному распределению;
- 2) экспериментальные результаты подчиняются «засоренному» распределению.

Вариант первый:

$$x_{\text{ср}} = (10 + 10 + 13 + 14 + 15 + 19 + 20)/7 = 14,4,$$

$$S_x = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{N - 1}} = 4,0.$$

Вариант второй:

$$x_{\text{ср}} = \text{med}(x) = 14,$$

$$S_x = k_n W = 0,37 \cdot 10 = 3,7.$$

Обобщенной характеристикой экспериментального распределения является коэффициент вариации  $v$ , который определяется по формуле (1.21)

$$v = \frac{S_x}{x}. \quad (1.21)$$

Предполагают, что при величине  $v < 0,1$  выборка считается однородной и описывается одним законом распределения. Чем меньше значение  $v$ , тем лучше выборка описывает экспериментальные данные.

Для того чтобы охарактеризовать рассеяние наблюдаемых значений количественного признака выборки вокруг своего среднего значения, вводят сводную характеристику — выборочную дисперсию. *Выборочной дисперсией* называют среднее арифметическое квадратов отклонений наблюдаемых значений признака от их среднего значения.

Если все значения  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  различны, то дисперсия считается по формуле (1.22)

$$D_B = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n}. \quad (1.22)$$

Если значения признака  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  имеют соответствующие частоты  $n_1, n_2, n_3, \dots, n_k$ , то, принимая во внимание тот факт, что сумма частот  $n_1 + n_2 + n_3 + \dots + n_k = n$ , дисперсия определяется по формуле (1.23)

$$D_B = \frac{\sum_{i=1}^k n_i (x_i - \bar{x})^2}{n}. \quad (1.23)$$

Величина среднеквадратичного отклонения в квадрате равняется дисперсии (1.24)

$$D_B = S_x^2. \quad (1.24)$$

Дисперсия равна разности между математическим ожиданием квадрата случайной величины и квадратом ее математического ожидания (1.25).

$$D_x = M(x^2) - [M(x)]^2 \Rightarrow D_x = \frac{\sum x_i^2}{n} - \left( \frac{\sum x_i}{n} \right)^2. \quad (1.25)$$

Свойства дисперсии:

- 1) дисперсия постоянной величины равна 0

$$D(A) = 0, A = \text{const}; \quad (1.26)$$

- 2) постоянный множитель можно выносить за знак дисперсии, возводя его в квадрат,

$$D(kX) = k^2 D(X); \quad (1.27)$$

- 3) дисперсия суммы независимых величин равна сумме дисперсий этих величин

$$D(X + Y) = D(X) + D(Y); \quad (1.28)$$

- 4) дисперсия суммы постоянной и случайной величин равняется дисперсии случайной величины

$$D(A + X) = D(X), \quad A = \text{const}; \quad (1.29)$$

- 5) дисперсия разности двух независимых случайных величин равняется сумме дисперсий этих величин

$$D(X - Y) = D(X) + D(Y). \quad (1.30)$$

Формулы (1.26)–(1.30) используются для оценки дисперсии нескольких случайных величин.

Кроме среднего значения и дисперсии для оценки кривых плотности распределения случайных величин используют характеристики асимметрии и эксцесса. Если экспериментальные данные (выборки из генеральной совокупности) не сгруппированы по интервалам, асимметрия и эксцесс определяются по формулам (1.31)

$$\begin{aligned} As &= \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^3}{nS_x^3}; \\ Ex &= \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^4}{nS_x^4} - 3. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Для оценки крутизны распределения и величины подъема кривой распределения пользуются эксцессом. Если эксцесс равен 0, то распределение случайной величины подчиняется нормальному закону. Если величина эксцесса положительная,

то получают кривые распределения более острые, чем кривая нормального распределения, в противоположном случае — более плоские (рис. 1.9).

Асимметрия характеризует смещение моды распределения относительно медианы. При положительной асимметрии  $As$  максимум кривой плотности распределения смещен к началу координат, при отрицательной величине  $As$  — в сторону больших значений  $x$  относительно точного выполнения нормального распределения (рис. 1.10).

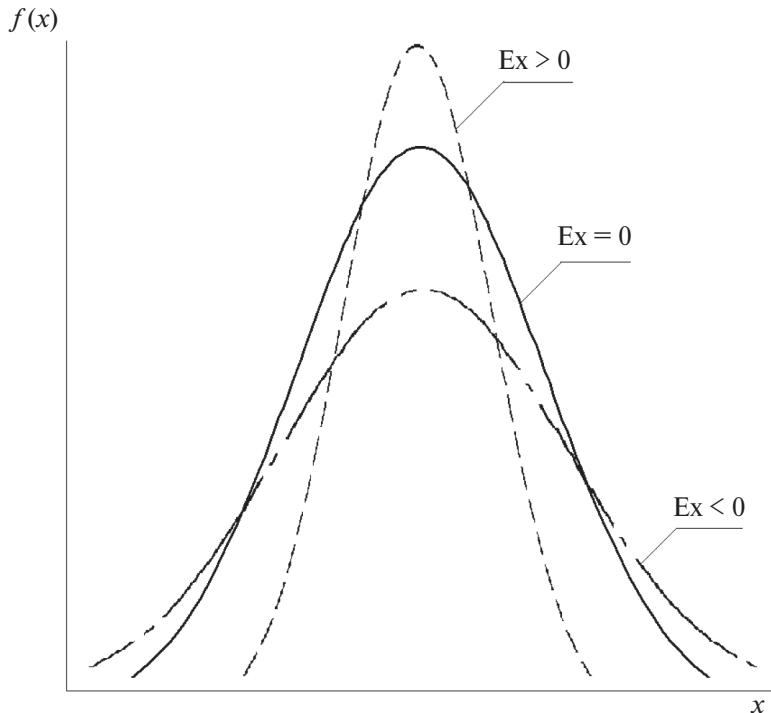


Рис. 1.9. Вид распределения случайной величины в зависимости от значений эксцесса

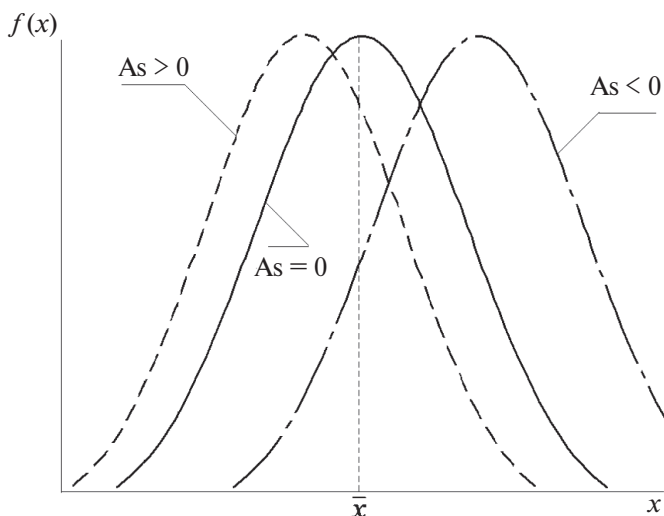


Рис. 1.10. Вид распределения случайной величины в зависимости от значений асимметрии

## Законы распределения

Кроме нормального закона распределения случайной величины, существует большое число других законов распределения.

1) Закон распределения Пуассона (закон распределения редких событий)

$$P_n = \frac{a^m \exp(-a)}{m!}, \quad (1.32)$$

где  $a$  — математическое ожидание;  $m$  — частота встречаемости интересующего нас события, выражается в целых числах.

Закон распределения редких дискретных событий (1.32) действует при описании частоты наступления катастроф, несчастных случаев и т. д., т. е. когда вероятность наступления события мала, а объем выборки достаточно велик ( $n > 10^4$ ).

## 2) Хи-квадрат распределение ( $\chi^2$ ).

Если существует генеральная совокупность, для которой величины  $u_1, u_2, \dots, u_n$  подчиняются нормальному закону распределения случайных величин, причем математическое ожидание каждой из этих величин равняется 0, а среднеквадратичное отклонение равняется 1, то сумма квадратов этих величин  $u_1^2 + u_2^2 + \dots + u_n^2 = \sum_{i=1}^n u_i^2 = \chi^2$  подчиняется  $\chi^2$ -распределению.

## 3) $t$ -Распределение (распределение Стьюдента).

Если  $U$  (некоторая случайная величина) подчиняется нормальному закону распределения и для нее  $a = 0$ ,  $\sigma = 1$ , а  $V$  — независимая от  $U$  величина, распределенная по закону  $\chi^2$ , то величина  $t = \frac{U}{\sqrt{V/f}}$  имеет распределение Стьюдента, где

$f$  — число степеней свободы, вычисляемое как разность между количеством членов выборки и числом констант, применяемых для вычисления заданной величины.

Распределение Стьюдента зависит только от объема выборки и при числе членов выборки, стремящемся к бесконечности, приближается к нормальному закону распределения.

## 4) Распределение Фишера ( $F$ -распределение).

Если величины  $U$  и  $V$  — независимые случайные величины, распределенные по закону хи-квадрат, со степенями свободы  $f_1$  и  $f_2$  соответственно, то распределение вида (1.33)

$$F = \frac{U / f_1}{V / f_2} = \frac{U}{V} \frac{f_2}{f_1} \quad (1.33)$$

называется распределением Фишера.

## Надежность оценки математического ожидания и среднеквадратичного отклонения

Определение надежности оценки математического ожидания является важной математической задачей, т. к. эта величина характеризует точность определения моментов функции распределения. Эта задача сводится к отысканию числа  $\delta$ , позволяющего определить границу интервала, содержащего искомую величину математического ожидания с определенным уровнем надежности  $p$ , называемым *доверительной вероятностью*. Величину  $\alpha = 1 - p$  называют *уровнем значимости*, который показывает вероятность неприятия проверяемой гипотезы, если она верна. Для математического ожидания запишем неравенство (1.34)

$$\bar{x} - \delta \leq a \leq \bar{x} + \delta. \quad (1.34)$$

Величина  $\delta$  имеет размерность основной величины и равняется абсолютной ошибке для принятой доверительной вероятности. Оценка величины математического ожидания фактора рассчитывается по формуле (1.35)

$$\delta = \frac{S_x}{\sqrt{n}} t_{\alpha, f}, \quad (1.35)$$

где  $S_x$  — среднеквадратичное отклонение случайной величины  $x$  в выборке объемом  $n$ ;  $t$  — критерий Стьюдента для уровня значимости  $\alpha$  и числа степеней свободы  $f$ .

Величина критерия Стьюдента зависит от числа измерений  $n$  и принятой доверительной вероятности  $p$  (уровня значимости  $\alpha$ ). Коэффициент Стьюдента определяется из таблиц, где  $\alpha$  — заданный уровень значимости, а  $f$  — число степеней свободы, определяемое по формуле (1.36)

$$f = n - 1. \quad (1.36)$$



Соответственно может быть решена и обратная задача, т. е. по заданным заранее величине ошибки  $\delta$  и доверительной вероятности  $p$  по формуле (1.37) можно определить необходимый объем выборки

$$n = \left( \frac{S_x}{\delta} t_{\alpha, f} \right)^2. \quad (1.37)$$

Поскольку величина критерия Стьюдента также зависит от объема выборки через число степеней свободы, постольку поиск оптимального объема выборки осуществляется методом последовательных приближений (итераций).

**Пример.** Проведено 100 измерений некоторой физической величины. Выборочное среднее  $x_{\text{ср}} = 20$ , среднеквадратичное отклонение  $S_x = 3$ , критерий Стьюдента  $t_{0,05; 99} = 1,96$ . Величина абсолютной ошибки  $\delta = 3/(100)^{0,5} \cdot 1,96 \approx 0,6$ .

Таким образом, величина математического ожидания  $a$  лежит в интервале  $19,4 < a < 20,6$ .

Аналогично оценке математического ожидания по заданной доверительной вероятности можно оценить доверительный интервал среднеквадратичного отклонения  $S_x$ , величина которого подчиняется  $\chi^2$ -распределению. Как и для  $t$ -критерия, существуют специальные таблицы, по которым можно определить интервал изменения среднеквадратичного отклонения с заданной доверительной вероятностью, т. е. генеральное среднеквадратичное отклонение попадает в интервал вычисленных значений согласно неравенству (1.38)

$$\begin{aligned} S_x(1-q) \leq \sigma \leq S_x(1+q), \\ q = f(n), \end{aligned} \quad (1.38)$$

$q$  определяется из таблиц.

**Пример.**  $n = 25$ ;  $S_x = 0,5$ ;  $p = 0,99$ ; из таблиц  $q = 0,73$ ; тогда  $0,5 \cdot (1 - 0,73) < \sigma < 0,5 \cdot (1 + 0,73)$ ,  
или  $0,135 < \sigma < 0,865$ .

Для малых объемов выборки величина  $q > 1$ , тогда используют неравенство (1.39), предполагая, что величина  $\sigma$  неотрицательна,

$$0 \leq \sigma \leq S_x(1 + q). \quad (1.39)$$

С точки зрения практики исследователя всегда интересует максимальная величина погрешности (ошибки). При определении доверительного интервала измерения генерального среднего квадратичного отклонения необходимо руководствоваться максимальной величиной  $\sigma$ .

## Первичная обработка результатов эксперимента

Для дальнейших расчетов результаты эксперимента наиболее удобно представлять в виде эмпирических рядов распределения случайной величины. Эмпирический ряд распределения представляет собой таблицу, в которой записаны значения случайной величины. Прежде чем вычислять параметры выборки из генеральной совокупности, необходимо провести проверку на наличие резко выделяющихся наблюдений (грубых ошибок).

Одним из критериев подобной проверки является критерий Шовене. Согласно этому критерию некоторые измерения из совокупности  $N$  измерений должны быть отброшены, если вероятность их появления не превышает величину

$$P \leq 1 / (2N).$$

Существуют таблицы, в которых в зависимости от числа наблюдений нормируется величина максимального или мини-

мального значения относительно среднего. Если выполняется условие  $|x_{\min(\max)} - \bar{x}| > \delta$ , то значение  $x$  должно быть отброшено.

$$\delta = k S_x, \quad (1.40)$$

где  $k$  — критерий Шовене (см. ниже),  $S_x$  — среднеквадратичное отклонение случайной величины.

Значения критерия Шовене  $k$  в зависимости от объема выборки  $n$ :

$n$	5	6	7	8	9	10	30	50	100
$k$	1,68	1,75	1,81	1,86	1,92	1,95	2,39	2,58	2,8

Порядок выполнения отсеивания критических значений следующий:

- 1) строится вариационный ряд;
- 2) вычисляются параметры вариационного ряда (среднее значение, среднеквадратичное отклонение) и по формуле (1.40) находится величина  $\delta$ ;
- 3) проверяется в зависимости от объема выборки первый (последний) член вариационного ряда;
- 4) при отбрасывании одного из значений следует проверить выборку еще раз на наличие грубых ошибок, для чего вновь пересчитывают значения среднего и среднеквадратического отклонения вариационного ряда для  $n - 1$  членов.

Существуют другие критерии отбора данных.

- 1) Критерий Романовского, по которому следует рассчитать параметры вариационного ряда (среднее значение и среднеквадратичное отклонение) без резко выделяющихся значений, а затем сравнить по формуле (1.41), задавшись условием значимости, расхождение по модулю с заданным табличным значением  $R$

$$|x_{n+1} - \bar{x}| < R. \quad (1.41)$$

- 2) Критерий Ирвина. Сначала рассчитывают величины  $\bar{x}$  и  $S_x$  для всей выборки, а затем проверяют, выполняется ли неравенство (1.42)

$$\left| \frac{x_{n+1} - \bar{x}}{S} \right| > \lambda, \quad (1.42)$$

где  $\lambda$  — критерий Ирвина.

После отбрасывания резко выделяющихся грубых ошибок следует пересчитать параметры выборки. Затем надо перейти к построению таблиц, содержащих значения измеренной величины, число повторений одинаковых значений величины и величину накопленных частот.

## Табличное представление данных

Допустим, что получен некоторый массив экспериментальных данных. Такие числовые характеристики, как среднее значение или среднее абсолютное отклонение от некоторого заданного значения, могут быть вычислены непосредственно. Однако нередко необходимо иметь более полную информацию без сохранения точных деталей первоначальных наблюдений. Удобным способом, обеспечивающим выполнение этих требований, является группировка данных. В процессе группировки данных первоначально наблюдаемые значения теряются, но если число групп выбрано правильно, то сохраняется удовлетворительное общее представление о полученных фактических данных.

Первым этапом при составлении таблиц сгруппированных данных является принятие решения об объеме групп (или ширине интервалов группировки). Можно выбрать такую малую группу, что даже небольшие случайные колебания будут способны исказить общую картину. Однако при слишком малом числе групп нельзя получить достаточно детальной картины.

Обычно берется 5...20 интервалов группировки. Выбор точного числа интервалов зависит:

- 1) от размаха имеющихся данных, т. е. разности между наибольшим и наименьшим выборочным значением;
- 2) удобного объема группы;
- 3) общего числа наблюдений.

Для того чтобы полученное распределение было репрезентативным (представительным), обычно руководствуются условием  $6 \leq m \leq 20$ . Число интервалов разбиения  $m$  рассчитывается по формулам (1.43):

$$\begin{aligned} m &= \sqrt{n}; \\ m &= 5 \lg n; \\ m &= 1 + 3,32 \lg n. \end{aligned} \tag{1.43}$$

Для построения сгруппированного ряда нужно иметь данные, распределенные по группам (или интервалам), каждая из которых охватывает некоторый интервал значений  $x$  постоянной ширины, т. е. интервал группировки. Интервал группировки представляет собой группу значений, попадающих в данный интервал. Сначала выбираем ширину интервала группировки  $\Delta x$  и по формуле (1.44) находим границы интервалов

$$\Delta x = (x^{\max} - x^{\min})/m. \tag{1.44}$$

В каждом из этих интервалов группировки определяем частоту попадания в интервал  $f$ . Определим пределы интервала группировки — это наибольшее и наименьшее возможные значения, которые могут находиться в данном интервале. Границы интервала лежат между наибольшим значением одного интервала и наименьшим значением следующего интервала, содержащего большие значения. Это относится ко всем границам интервалов, кроме первой и последней, которые можно вычислить исходя из условия постоянства расстояния между границами каждого интервала. Наконец, в качестве представительного значения каждого интервала группировки будем ис-

пользовать срединное значение  $X$ . Оно находится посередине между границами интервала.

При использовании границ интервалов совместно со срединными значениями обеспечивается легкость и точность табличного представления данных. В случае задания только срединного значения возрастает вероятность появления ошибок при составлении таблиц.

Существует несколько общих правил группировки необработанных данных по интервалам, помогающих избежать путаницы и обеспечивающих более эффективное составление таблиц:

- 1) при выборе числа интервалов группировки лучше всего ориентироваться на 10...20 интервалов. Иногда делаются исключения из этого правила, но при слишком большом числе интервалов ощущается влияние даже небольших случайных колебаний;
- 2) предпочтительно иметь интервалы одинаковой ширины;
- 3) необходимо охватывать всю область данных. Если неизвестны предельные значения, то невозможно вычислить некоторые выборочные параметры;
- 4) интервалы не должны перекрываться. Не должно возникать никаких сомнений относительно того, в какой интервал попадает любое конкретное значение;
- 5) нужно выбирать удобные интервалы группировки. Следует выбирать либо кратную, либо обоснованную ширину интервала.

## Графическое представление эмпирических распределений

---

Наиболее распространенными способами представления эмпирических данных являются гистограмма, полигон частот и полигон накопленных частот.

Гистограмма состоит из последовательности примыкающих друг к другу прямоугольников, как показано на рис. 1.11.

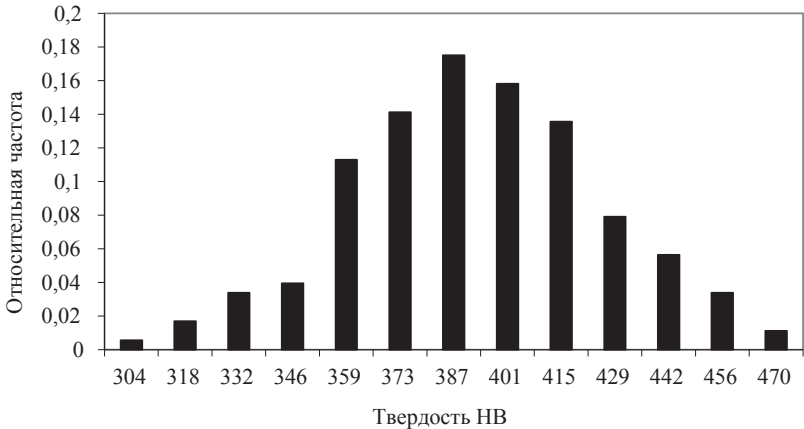


Рис. 1.11. Гистограмма распределения твердости отливок

Ширина этих прямоугольников равна ширине интервалов группировки и откладывается по оси абсцисс ( $X$ ), а их высота измеряется по оси ординат ( $Y$ ). Число наблюдений, попадающих в определенный интервал, определяется по высоте соответствующего прямоугольника. Основание прямоугольника равно ширине интервала группировки.

Еще одним способом графического изображения данных является построение полигона частот, представляющего собой многоугольник с вершинами в точках, соответствующих срединным значениям интервалов и частотам, как показано на рис. 1.12.

На рис. 1.13 показан полигон накопленных (кумулятивных) частот. Вершины полигона накопленных частот имеют координаты, соответствующие верхней границе интервала и накопленной частоте. Если говорят, что накопленная частота для наименьшего интервала равна 2, то это означает, что имеется

два значения, меньших 153. Полигон накопленных частот используется главным образом для представления дискретных данных, например таких, как число дефектных изделий в партии или число зерен при переходе по размерным группам.

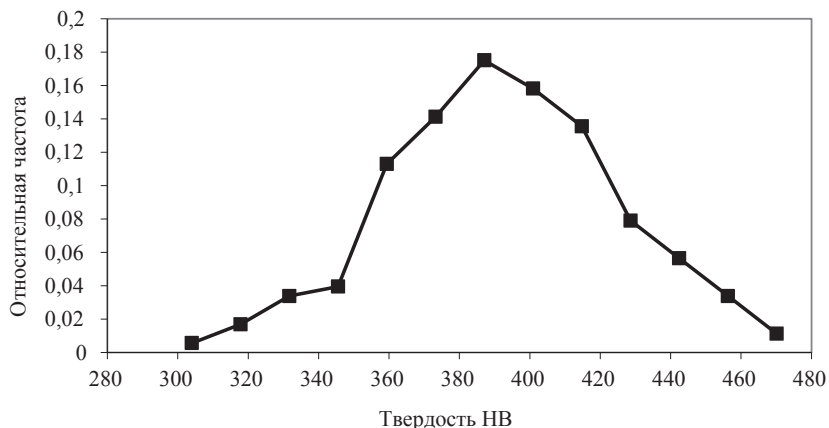


Рис. 1.12. Полигон частот

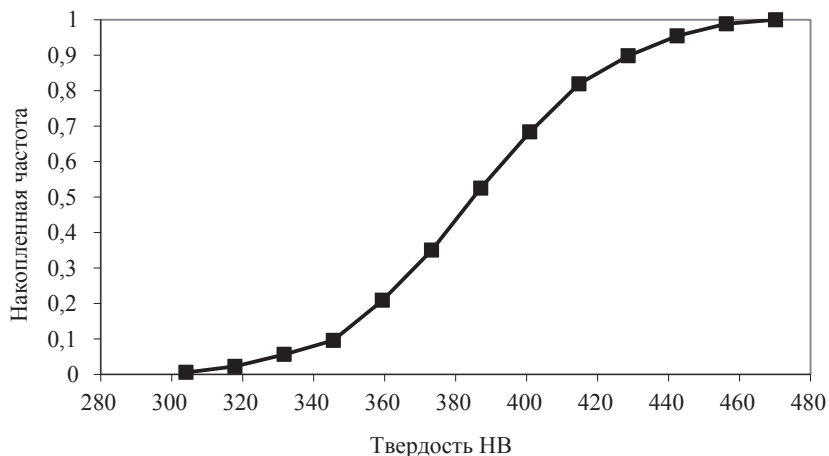


Рис. 1.13. Полигон накопленных частот



Частота является экспериментальным аналогом функции плотности распределения, а накопленная (частота) частость — аналогом интегральной функции распределения.

## Критерии значимости

После вычисления статистических параметров распределения необходимо проверить гипотезу, принадлежат ли данные распределения к одной генеральной совокупности и подчиняется ли распределение закону Гаусса (является ли распределение нормальным). Эти задачи решают при помощи критериев значимости. Вычисленное значение критерия значимости сравнивается с табличным и на основании этого сравнения делается вывод о том, следует принять или отвергнуть данную гипотезу. Такое сравнение проводится для определенного заранее уровня значимости.

Различают три вида критериев значимости:

- 1) параметрические критерии значимости служат для проверки гипотезы о параметрах распределения изучаемой случайной величины;
- 2) непараметрические критерии значимости не связаны с параметрами распределения, например, ранговые критерии;
- 3) критерий согласия служит для проверки гипотезы о соответствии эмпирического распределения случайной величины нормальному закону распределения.

К параметрическим критериям значимости относятся следующие.

- 1) *F*-Критерий (критерий Фишера).

Пусть даны две экспериментальные выборки ( $x$  и  $y$ ) случайной величины. Проверяется гипотеза, что выборки  $x$  и  $y$  взяты из одной генеральной совокупности с дисперсией  $\sigma^2$ .

$$H_0 : S_x^2 = S_y^2 = \sigma^2.$$

Проверку гипотезы осуществляют следующим образом:

- записываются эмпирические ряды распределения случайных величин  $x$  и  $y$

$$\begin{array}{ccccccc} x_1 & x_2 & x_3 & \dots & x_n \\ y_1 & y_2 & y_3 & \dots & y_n \end{array}$$

- рассчитываются соответствующие дисперсии  $S_x^2, S_y^2$ ;
- по формуле (1.45) рассчитывается расчетное значение критерия Фишера

$$F_p = \frac{S_x^2 / f_1}{S_y^2 / f_2}, \quad (1.45)$$

где  $f_1$  и  $f_2$  — степени свободы выборок  $x$  и  $y$  соответственно.

Из таблиц распределения Фишера для заданного уровня значимости  $\alpha$  и соответствующих степеней свободы числителя и знаменателя определяется значение  $F_{\text{табл}}$ . Если  $F_p < F_{\text{табл}}$ , то нулевая гипотеза верна. В противном случае нулевая гипотеза  $H_0$  отвергается.

## 2) $t$ -Критерий (критерий Стьюдента).

Проверим гипотезу, что среднее значение случайной величины некоторой выборки равняется математическому ожиданию генеральной совокупности

$$H_0 : \bar{x} = a.$$

Проверку осуществляют следующим образом:

- записывают эмпирический ряд распределения;
- рассчитывают среднеквадратичное отклонение  $S_x$  и выборочное среднее значение  $\bar{x}$ ;
- по формуле (1.46) рассчитывают значение  $t$ -критерия

$$t = \frac{|a - \bar{x}|}{S_x} \sqrt{n}; \quad (1.46)$$

- для заданного уровня значимости и степени свободы  $f$  ( $f = n - 1$ ) определяют табличное значение критерия Стьюдента  $t_{\alpha, f}$ . Если  $t_p < t_{\alpha, f}$ , то гипотеза принимается. В противном случае отвергается.

## Критерии согласия

*Критерием согласия* называют критерий проверки гипотезы о предполагаемом законе неизвестного распределения. Для расчета (оценки) критерия согласия необходимо построить эмпирический ряд распределения и изобразить его графически в виде гистограммы накопленных частот. По вычисленным значениям среднеквадратического отклонения и выборочного среднего рассчитывают теоретические частоты и сравнивают их с экспериментальными. Существуют критерии согласия Пирсона ( $\chi^2$  — читается «хи-квадрат») и Колмогорова ( $\lambda$ ).

Рассмотрим применение критерия Пирсона к проверке гипотезы о нормальном распределении генеральной совокупности (критерий аналогично применяется и для других распределений, в этом состоит его достоинство). С этой целью будем сравнивать эмпирические (наблюдаемые) и теоретические (вычисленные в предположении нормального распределения) частоты.

Обычно эмпирические и теоретические частоты различаются. Возможно, что расхождение случайно (незначимо) и объясняется либо малым числом наблюдений, либо способом их группировки, либо другими причинами. Возможно, что расхождение частот неслучайно (значимо) и объясняется тем, что теоретические частоты вычислены исходя из неверной гипотезы о нормальном распределении генеральной совокупности.

Критерий Пирсона отвечает на поставленный выше вопрос о проверке гипотезы на с. 40. Правда, он не доказывает спра-

ведливость гипотезы, а лишь устанавливает на принятом уровне значимости ее согласие или несогласие с данными наблюдений.

Итак, пусть по выборке объема  $n$  получено эмпирическое распределение

значения $X$	$x_1$	$x_2$	$x_s$
эмпирические частоты $n_i$	$n_1$	$n_2$	$n_s$

Допустим, что в предположении нормального распределения генеральной совокупности вычислены теоретические частоты  $n'$ . При уровне значимости  $\alpha$  требуется проверить нулевую гипотезу: генеральная совокупность распределена нормально.

В качестве критерия проверки нулевой гипотезы примем случайную величину вида

$$\chi^2 = \sum (n_i - n'_i)^2 / n'_i. \quad (1.47)$$

Эта величина случайная, т. к. в разных опытах она принимает различные, заранее неизвестные значения. Ясно, что чем меньше в формуле (1.47) различаются эмпирические и теоретические частоты, тем меньше величина критерия  $\chi^2$ , и следовательно, он в известной степени характеризует близость эмпирического и теоретического распределений.

Доказано, что при  $n \rightarrow \infty$  закон распределения случайной величины ( $\chi^2$ ), независимо от того, какому закону распределения подчинена генеральная совокупность, стремится к закону распределения  $\chi^2$  с  $f$  степенями свободы. Поэтому сам критерий называют критерием согласия  $\chi$ -квадрат.

Число степеней свободы находят по равенству  $f = s - 1 - r$ , где  $s$  — число групп (частичных интервалов) выборки;  $r$  — число параметров предполагаемого распределения, которые оценены по данным выборки. В частности, если предполагаемое распределение нормальное, то оценивают два параметра (математическое ожидание и среднее квадратичное отклонение), поэтому  $r = 2$  и число степеней свободы  $f = s - 1 - 2 = s - 3$ .

Таким образом, для того чтобы при заданном уровне значимости проверить нулевую гипотезу  $H_0$  (о том, что генеральная совокупность распределена нормально), надо сначала вычислить теоретические частоты, а затем по формуле (1.48) — наблюдаемое значение критерия

$$\chi^2_{\text{набл}} = \sum (n_i - n'_i)^2 / n'_i \quad (1.48)$$

и из таблицы критических точек распределения  $\chi^2$  по заданному уровню значимости  $\alpha$  и числу степеней свободы  $f = s - 3$  определить критическую точку  $\chi^2_{\text{кр}}(\alpha; f)$ . Если  $\chi^2_{\text{набл}} < \chi^2_{\text{кр}}$ , нет оснований отвергнуть нулевую гипотезу. Если  $\chi^2_{\text{набл}} > \chi^2_{\text{кр}}$ , нулевую гипотезу отвергают.

## ГЛАВА 2.

# Корреляционный и регрессионный анализ

---

### Основные понятия

---

Любой технологический процесс может быть охарактеризован определенным числом факторов и входных параметров, которые в различной мере влияют на выходные параметры. Целью исследования часто является установление количественной зависимости выходного параметра какого-либо процесса от одного или группы входных параметров в условиях нестабильности значений входных и выходных параметров, обусловленной влиянием случайных и не поддающихся учету факторов.

Пусть существует некоторое множество эмпирических значений  $X$  и  $Y$ . Если каждому значению из множества  $X$  соответствует только одно значение из множества  $Y$ , то говорят, что между этими переменными существует некоторая функциональная связь.

Если некоторому значению из множества  $X$  соответствует множество значений из множества  $Y$  и если области значений из множества  $X$  также соответствует множество из множества  $Y$ , то говорят, что между этими переменными существует стохастическая (вероятностная) связь (рис. 2.1).

Для определения зависимости  $X$  от  $Y$  в первом и втором случае используют регрессионный анализ. В третьем случае — корреляционный анализ.

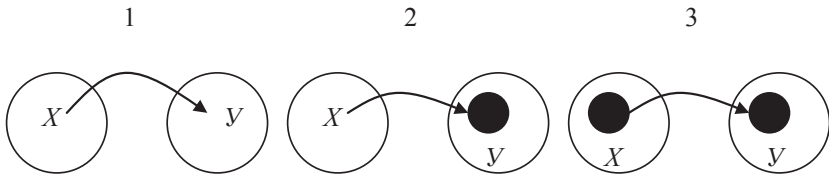


Рис. 2.1. Иллюстрация функциональной (1) и стохастической (2, 3) связей между переменными  $X$  и  $Y$

Регрессионный анализ объединяет практические методы исследования некоторой статистической величины в зависимости от одной или нескольких переменных.

Корреляционный анализ позволяет выделить тесноту взаимосвязи между двумя или несколькими случайными признаками или факторами. Корреляционная связь занимает промежуточное положение между функциональной связью и полным ее отсутствием. Смещение корреляционной связи в ту или иную сторону обусловлено влиянием двух составляющих:

- 1) функциональной — определяется объективно действующими физическими или технологическими связями между переменными;
- 2) случайной — является результатом влияния многочисленных неучитываемых факторов.

Преобладание первой составляющей сдвигает корреляционную зависимость в сторону функциональной связи, а преобладание второй составляющей — в сторону полной независимости случайных величин. Если между независимой входной величиной  $X$  и зависимой величиной  $Y$  предполагается или существует корреляционная связь, то ее можно оценить или исследовать с помощью метода корреляционного анализа.

Простейшей и распространенной зависимостью между  $X$  и  $Y$  является линейная регрессия, на основе которой можно оценивать линейную и парную корреляционную связь между этими величинами. Задача нахождения выборочного уравне-

ния регрессии и последующей проверки значимости его коэффициентов, оценка тесноты или силы связи между  $X$  и  $Y$  также решается методами корреляционного анализа.

## Основные допущения регрессионного анализа

Основными допущениями регрессионного анализа являются следующие:

- 1) переменная  $Y$  является случайной величиной, распределенной по нормальному закону;
- 2) при фиксированном значении  $X$  дисперсия  $Y$  постоянна;
- 3) ошибка в определении переменной  $X$  пренебрежимо мала по сравнению с ошибкой в определении переменной  $Y$ .

Графическое отображение изменения переменной  $Y$  в зависимости от изменения переменной  $X$  описывается линией регрессии (рис. 2.2).

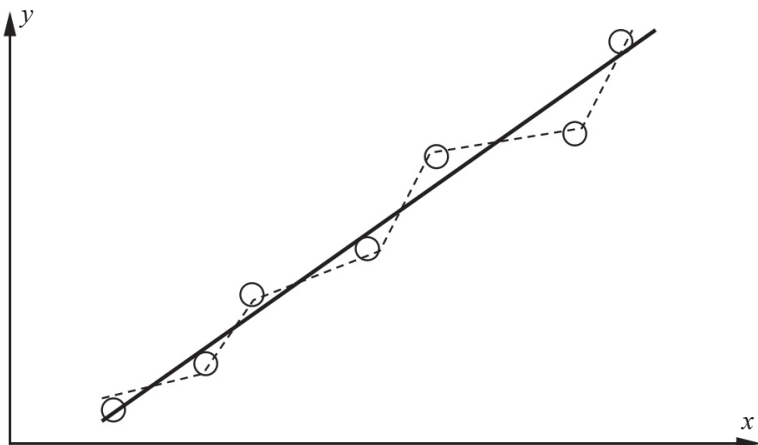


Рис. 2.2. Эмпирическая и теоретическая линии регрессии



*Линия регрессии* — геометрическое место точек некоторого среднего показателя рядов переменной  $У$ . Уравнение, описывающее линию регрессии, называется *уравнением регрессии*.

Рассмотрим линию регрессии от одного параметра. Пусть для произвольного фиксированного значения  $X$  получено несколько значений  $У$ . Предполагается, что величина  $У$  распределена по нормальному закону с математическим ожиданием  $m_y$

$$m_y = b_0^* + b_1^* x \quad (2.1)$$

и дисперсией  $\sigma_y^2$ , не зависящей от  $X$ .

Из выражения математического ожидания (2.1) следует, что случайная величина  $У$  в среднем линейно зависит от фиксированного значения  $X$ , а параметры  $b_0^*$ ,  $b_1^*$ ,  $\sigma_y^2$  являются неизвестными параметрами генеральной совокупности. Для оценки этих неизвестных величин по выборке объемом  $n$  сопряженных пар значений  $x_1y_1, x_2y_2, \dots, x_ny_n$  в декартовой системе координат можно построить корреляционное поле, содержащее  $m$  точек. Расположение точек на корреляционном поле в общем оказывается неслучайным и подчиняется определенной зависимости. Если нанести на поле среднее значение  $\bar{y}_i$ , соответствующее всем значениям переменной  $x_i$  в интервалах, ограниченных вертикальными линиями в координатной сетке, то зависимость  $y(x)$  может стать более очевидной.

Ломаная линия, соединяющая точки  $\bar{y}_i$ , отнесенные к серединам интервалов  $\bar{x}_i$ , называется *эмпирической линией регрессии* (рис. 2.2). С увеличением числа опытов ломаная линия будет сглаживаться и избавляться от случайных зигзагов, приближаясь к некоторой предельной линии — *теоретической линии регрессии*.

В общем случае форма линии регрессии определяется характером зависимости между  $X$  и  $У$ . Для линейной зависимости линия регрессии задается уравнением линии  $y$  (2.2)

$$y = \beta_0 + \beta_1 x, \quad (2.2)$$

которая должна проходить максимально близко к точкам корреляционного поля.

## Определение коэффициентов уравнения регрессии

Пусть существует зависимость  $Y(x)$  такая, что величина  $Y$  нормально распределена для любого значения  $x$ . Но существует тенденция, что с увеличением  $x$  происходит увеличение значений  $Y$ . Стоит задача определить коэффициенты уравнения, наилучшим образом описывающего экспериментальные результаты. В большинстве случаев принимают, что сумма квадратов отклонений экспериментальных значений от расчетных должна быть минимальна. Это требование реализуется путем применения метода наименьших квадратов и сводится к тому, чтобы расстояние по вертикали между опытными точками с координатами  $(x_i, y_i)$  и соответствующими точками, лежащими на искомой линии регрессии, было минимальным. Данное условие можно записать в виде формулы (2.3)

$$\sum_{i=1}^n [y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)]^2 \rightarrow \min. \quad (2.3)$$

Существуют и другие способы минимизации отклонений:

- 1) принимается минимальной сумма модулей разности экспериментальной и расчетной величин

$$\sum_{i=1}^n |y_{i,\text{эксп}} - y_{i,\text{расч}}| \rightarrow \min;$$

- 2)  $\sum_{i=1}^n (y_{i,\text{э}} - y_{i,\text{р}})^3 \rightarrow \min.$

Пусть уравнение регрессии имеет вид  $y = ax + b$ , где  $a$  и  $b$  — неизвестные коэффициенты уравнения.

Введем величину  $\theta = \sum (y_3 - y_p)^2 \rightarrow \min$ , т. е.

$$\theta = \sum (y_3 - ax - b)^2 \rightarrow \min. \quad (2.4)$$

Взяв частные производные по  $a$  и  $b$  в формуле (2.4) и приравняв их к 0, построим систему уравнений вида (2.5) и (2.6)

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta}{\partial a} = 0; & \left\{ \sum -2x_i (y_i - ax_i - b) = 0; \right. \\ \frac{\partial \theta}{\partial b} = 0; & \left\{ \sum -2(y_i - ax_i - b) = 0. \right. \end{cases} \quad (2.5)$$

$$\begin{cases} \sum x_i y_i - a \sum x_i^2 - b \sum x_i = 0; \\ \sum y_i - a \sum x_i - \sum b = 0. \end{cases} \quad (2.6)$$

Поскольку  $\sum b = nb$ , система примет вид (2.7)

$$\begin{cases} a \sum x_i^2 + b \sum x_i = \sum x_i y_i; \\ a \sum x_i + nb = \sum y_i. \end{cases} \quad (2.7)$$

Отсюда по формулам (2.8) и (2.9) определяются коэффициенты  $a$  и  $b$

$$a = \frac{\Delta a}{\Delta} = \frac{\begin{vmatrix} \sum x_i y_i & \sum x_i \\ \sum y_i & n \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum x_i^2 & \sum x_i \\ \sum x_i & n \end{vmatrix}} = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}, \quad (2.8)$$

$$b = \frac{\Delta b}{\Delta} = \frac{\begin{vmatrix} \sum x_i^2 & \sum x_i y_i \\ \sum x_i & \sum y_i \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \sum x_i^2 & \sum x_i \\ \sum x_i & n \end{vmatrix}} = \frac{\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i y_i \sum x_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}. \quad (2.9)$$

Для вычисления сумм необходимо составить таблицу, в которой приводятся ряды экспериментальных значений и соответствующих вспомогательных функций (2.10)

$$\begin{array}{cccc}
 n \left\{ \begin{array}{cccc} x_1 & y_1 & x_1^2 & x_1 y_1 \\ x_2 & y_2 & x_2^2 & x_2 y_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_n & y_n & x_n^2 & x_n y_n \end{array} \right. \\
 \hline
 \sum x_i & \sum y_i & \sum x_i^2 & \sum x_i y_i
 \end{array} . \quad (2.10)$$

Коэффициенты  $a$  и  $b$  уравнения регрессии определяются не точно, а с некоторыми ошибками  $\Delta a$  и  $\Delta b$ . Точность определения коэффициентов уравнения регрессии тем меньше, чем больше расхождение экспериментальных и расчетных значений.

Существует также нелинейная регрессия, когда используется более сложная, чем линейная, зависимость  $y(x)$ , например  $y = ax^2 + bx + c$ . В таком случае, применяя метод наименьших квадратов, получим выражение (2.11) и систему уравнений (2.12)

$$\theta = \sum (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)^2 \rightarrow \min, \quad (2.11)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta}{\partial a} = 0; \\ \frac{\partial \theta}{\partial b} = 0; \\ \frac{\partial \theta}{\partial c} = 0. \end{cases} \quad (2.12)$$

Ряд функций типа  $y = \frac{a}{x} + b$ ,  $y = ax^b$  можно путем несложных преобразований и введения новых переменных свести к линей-

ной зависимости, т.е. провести функциональную линейризацию (2.13)

$$t = \frac{1}{x} \Rightarrow y = at + b; \quad (2.13)$$

$$\ln y = y', \ln a = a', \ln x = x' \Rightarrow y' = a' + bx'.$$

Наиболее существенным вопросом является выбор определенной функции для описания экспериментальных данных. Задача решается достаточно легко, если имеют дело с «прозрачным ящиком» и вид зависимости априорно известен. Но если заранее вид зависимости неизвестен, то исходят из внешнего вида графика и начинают перебор функций с наиболее простых зависимостей, с наименьшим количеством коэффициентов.

Правомочность применения той или иной зависимости определяется с помощью критериев Фишера, Гаусса и Стьюдента.

Для определения критерия Фишера следует рассчитать дисперсию неадекватности  $S_{\text{неад}}$  (2.14), дисперсию воспроизводимости  $S_y$  (2.15) и по формуле (2.16) определить  $F_{\text{расч}}$

$$S_{\text{неад}}^2 = \frac{\sum (y_{i,\text{э}} - y_{i,\text{р}})^2}{n - k}; \quad (2.14)$$

$$S_y^2 = \frac{\sum (y_{i,\text{э}} - \bar{y})^2}{n - 1}; \quad (2.15)$$

$$F_{\text{расч}} = \frac{S_{\text{неад}}^2}{S_y^2}, \quad (2.16)$$

где  $n$  — число измерений;  $k$  — число коэффициентов в выбранной зависимости.

Полученное расчетное значение критерия Фишера  $F_{\text{расч}}$  сравнивают с табличным значением, задавшись определенным уровнем значимости и числом степеней свободы числителя  $f_1 = n - k$  и знаменателя  $f_2 = n - 1$ . Если  $(F_{\text{т}}/F_{\text{р}})$  больше 20...40, то расчетная

формула адекватно описывает уравнение модели. Если данное неравенство не выполняется, то уравнение регрессии нельзя использовать для описания экспериментальных данных и следует подобрать другую функцию, дающую лучшее приближение.

По критерию Гаусса следует по формуле (2.17) рассчитать сумму квадратов отклонений экспериментальных данных от расчетной зависимости и разделить ее на число степеней свободы

$$W = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - y_p)^2}{n - k}, \quad (2.17)$$

где  $n$  — число измерений;  $k$  — число коэффициентов, используемых в уравнении регрессии.

Например, для линейного уравнения используется уравнение (2.18), для параболы — (2.19)

$$\begin{aligned} y'_p &= ax + b, \\ W &= \frac{\sum (y_i - ax_i - b)^2}{n - 2}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\begin{aligned} y''_p &= ax^2 + bx + c, \\ W &= \frac{\sum (y_i - ax_i^2 - bx_i - c)^2}{n - 3}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Выбирается то уравнение, для которого критерий Гаусса меньше. Не следует повышать степень полинома выше 5...6, т. к. поведение функции  $y_p$  при промежуточных значениях  $x$  зачастую непредсказуемо.

По критерию Стьюдента следует по формуле (2.20) рассчитать значение  $t$ -критерия

$$t_p = \frac{|b - \bar{y}|}{S_y} \sqrt{n}, \quad (2.20)$$

где  $b$  — свободный член линейного уравнения;  $n$  — число экспериментов;  $S_y$  — среднеквадратичное отклонение, которое рассчитывается по формуле (2.21)

$$S_y = \sqrt{\frac{\sum (y_i - \bar{y})^2}{n-1}}. \quad (2.21)$$

Расчетное значение  $t$ -критерия сравнивается с табличным для заданного уровня значимости  $\alpha$  и числа степеней свободы  $f$ . Если  $t_p < t_{\alpha, f}$ , то коэффициент  $b$  значим. Уровень значимости обычно выбирают в пределах 1...5 %, реже — 10 %.

## Основные допущения корреляционного анализа

В корреляционном анализе существуют следующие допущения:

- 1) переменные  $X$  и  $Y$  являются случайными величинами, распределенными по нормальному закону;
- 2) некоторому значению  $X$  можно поставить в соответствие одно или несколько значений  $Y$ ;
- 3) по данному нормальному распределению случайных величин  $X$  и  $Y$  можно определить выборочное среднее и среднеквадратичное отклонение величин  $X$  и  $Y$ .

Величину  $d$  называют *коэффициентом детерминации*, который рассчитывается по формуле (2.22)

$$d = 1 - \frac{S_{\text{модели}}^2}{S_y^2}. \quad (2.22)$$

Величина  $d$  показывает, какая часть измерений переменной  $Y$  связана с линейной функциональной зависимостью от  $X$ , а оставшаяся часть — со случайным статистическим разбросом величины  $y$ .

Коэффициентом корреляции называют величину (2.23)

$$r = \sqrt{d}, \quad -1 \leq r \leq 1. \quad (2.23)$$

При изменении коэффициента корреляции  $r$  в данных пределах возможны следующие соотношения между  $y$  и  $x$  (рис. 2.3).

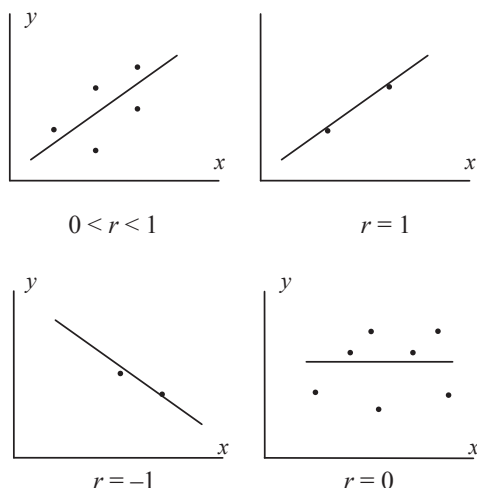


Рис. 2.3. Соотношение между  $y$  и  $x$  при различных значениях коэффициента корреляции  $r$

Если  $|r| > 0,7$ , то такая связь между  $x$  и  $y$  называется сильной, а если  $|r| < 0,7$ , то — слабой. При  $|r| > 0,95$  можно говорить о существовании линейной зависимости  $y$  от  $x$ . Наличие сильной связи говорит о возможной нелинейной зависимости  $y(x)$ .

## Определение выборочного коэффициента корреляции

При определении выборочного коэффициента корреляции сначала записывают эмпирические ряды измерения случайных



величин  $X$  и  $Y$ , получая  $N$  независимых опытов и  $N$  пар чисел  $x$  и  $y$ . Затем по формуле Пирсона (2.24) рассчитывают выборочное среднее и среднеквадратическое отклонение для множеств  $X$  и  $Y$  и коэффициент корреляции  $r$

$$r = \frac{1}{n-1} \frac{\sum (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{S_x S_y}. \quad (2.24)$$

Если среднеквадратичные отклонения рассчитаны для выборок объемом  $n > 25$ , то множитель  $1/(n-1)$  заменяется на  $1/n$ .

Величина  $\sum (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})$  носит название *ковариации* и обозначается  $\text{cov}(x, y)$ .

## Интерпретация коэффициента корреляции

На рис. 2.4 представлена графическая интерпретация изменения коэффициента корреляции в зависимости от  $\sqrt{d}$ . График зависимости представляет собой окружность. Уравнение окружности в общем виде имеет вид  $x^2 + y^2 = r^2$ .

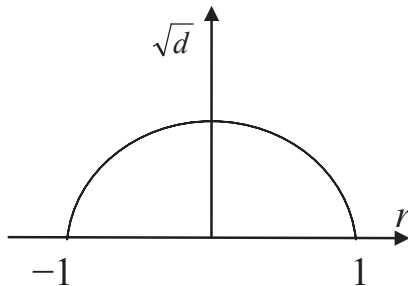


Рис. 2.4. Графическая интерпретация изменения коэффициента корреляции

Отсюда следует выражение (2.25)

$$r^2 + \frac{S_m^2}{S_y^2} = 1;$$

$$d = r^2 = 1 - \frac{S_m^2}{S_y^2}.$$
(2.25)

Чем больше степень корреляции между  $x$  и  $y$ , тем меньше дисперсия отклонения функции от линейной зависимости и тем меньше вклад вероятностной составляющей функции.

Интерпретировать коэффициент корреляции  $r$  можно как меру воздействия общих для  $x$  и  $y$  причин. Пусть переменная  $x$  линейно зависит от  $n + m$  переменных, а переменная  $y$  зависит от  $n + p$  переменных. Коэффициент корреляции  $r$  в этом случае рассчитывается по формуле (2.26)

$$r = \frac{n}{\sqrt{(n+m)(n+p)}} \quad (2.26)$$

при условии, что значения  $n$ ,  $m$ ,  $p$  достаточно велики.

Некоторая часть общих факторов  $n$  способствует линейной взаимосвязи между рядами переменных  $x$  и  $y$ . Интерпретация коэффициента корреляции  $r$  позволяет по величине коэффициента корреляции указать на тесноту линейной связи между переменными, а знак — на характер влияния. Выбор переменных коррелируемых величин должен быть оправдан.

## Надежность определения коэффициента корреляции

Выборочные коэффициенты корреляции для одной генеральной совокупности не подчиняются нормальному закону распределения. Если для малых значений  $r$  и достаточно большого числа  $n$  пар чисел  $x$  и  $y$  можно по формуле (2.27) оценить среднеквадратическое отклонение коэффициента корреляции

$$S_r = \frac{(1-r)^2}{\sqrt{n-1}} \text{ (для } -0,5 \leq r \leq 0,5), \quad (2.27)$$

то для малых значений  $n$  (менее 40) и критических значений  $r$  по модулю близких к единице такая зависимость непригодна. Для данных областей выборочное распределение коэффициента корреляции весьма асимметрично. Для устранения асимметрии английский статистик Рональд Фишер в 1938 г. предложил функцию  $Z$  (2.28), распределенную по закону близкому к нормальному распределению и зависящую от значений коэффициента корреляции  $r$ :

$$Z = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1+r}{1-r} \right). \quad (2.28)$$

В таком случае величину среднеквадратичного отклонения величины  $Z$  можно определить по формуле (2.29)

$$S_Z = \frac{1}{\sqrt{n-3}}. \quad (2.29)$$

Пересчитать пределы изменения  $r$  можно, зная величину  $S_z$ . Существуют специальные таблицы для определения вероятности попадания вычисляемой величины коэффициента корреляции в заданный интервал. По числу измерений  $x$  и  $y$  определяют величину коэффициента  $k$ , для заданной доверительной вероятности по формуле (2.30) рассчитывается интервал изменения величины  $S_z$

$$\Delta S_Z = k S_Z \text{ (} p = 0,99; n = 5; k = 2,78). \quad (2.30)$$

При положительном значении коэффициента корреляции  $r$  нижняя граница интервала изменения среднеквадратичного отклонения  $S_z$  зависит от величины  $Z$  больше, чем верхняя граница, что связано с начальной асимметрией исходного коэффициента корреляции.

**Пример.** Рассчитать величину  $S_z$  для  $r = -0,995$  и определить границу доверительного интервала ( $n = 5$ ;  $p = 0,99$ ).

$$Z = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1+r}{1-r} \right) = -2,99,$$

$$S_z = \frac{1}{\sqrt{5-3}} = 0,71,$$

$$\Delta S_z = 2,78 \cdot 0,7 = 1,96,$$

$$-4,960 \leq Z \leq -1,029.$$

По данным величинам  $Z$  решаем уравнение (2.28) относительно  $r$ .

Ответ:  $-0,999 \leq r \leq -0,774$ .

### **Использование коэффициента корреляции для расчета коэффициентов линейного уравнения вида $y = ax + b$**

Дан экспериментальный массив зависимости  $y$  от  $x$ , содержащий  $n$  пар чисел  $x_i$  и  $y_i$ . Предполагается наличие линейной зависимости  $y$  от  $x$  вида  $y = ax + b$ .

Определение коэффициентов  $a$  и  $b$  проводится в следующем порядке:

- 1) рассчитывают выборочные средние  $x_{\text{ср}}$  и  $y_{\text{ср}}$ , а также среднеквадратичные отклонения  $S_x$ ,  $S_y$  для массивов  $x$  и  $y$ . С помощью компьютерных программ *Excel*, *Open Office Calc* расчет может быть проведен с помощью Мастера функций — Статистические. Величина выборочных средних  $x_{\text{ср}}$  и  $y_{\text{ср}}$  рассчитывается при помощи функций СРЗНАЧ, среднеквадратичные отклонения  $S_x$ ,  $S_y$  — СТАНДОТКЛОН в программе Excel;

- 2) рассчитывают коэффициент корреляции между  $x$  и  $y$  по формуле Пирсона (уравнение (2.24)) или с помощью электронных таблиц. В программе Excel это выполняется с помощью функции КОРРЕЛ;
- 3) определяют коэффициенты линейного уравнения по формулам (2.31) и (2.32)

$$a = r_{xy} (S_y/S_x); \quad (2.31)$$

$$b = y_{cp} - ax_{cp}. \quad (2.32)$$

Получив искомые коэффициенты линейного уравнения с учетом того, что коэффициент корреляции  $r_{xy}$  также является случайной величиной, можно с помощью функции  $Z$  определить интервалы возможного изменения вычисленного коэффициента корреляции  $r_{xy}$  с заданной доверительной вероятностью. Полученные максимальные и минимальные значения коэффициента корреляции  $r_{xy}$  следует подставить в уравнение (2.31). Таким образом можно оценить границы возможного изменения коэффициента  $a$  линейного уравнения. Аналогичным образом рассчитываются границы интервала изменения для коэффициента  $b$ .

Относительно полученных коэффициентов линейного уравнения границы интервалов будут расположены асимметрично в силу исходной асимметрии распределения коэффициента корреляции. Поэтому, проводя вычисление коэффициентов  $a$  и  $b$ , необходимо оценить границы их возможных изменений и в соответствии с ними провести округление полученных результатов.

## Множественная корреляция

При исследовании влияния нескольких признаков на определенное свойство материала используется множественная корреляция, например необходимо выяснить влияние химического

состава сплава, ряда параметров термической обработки на механические или физические свойства. В этом случае зависимость между переменными  $Y$  и  $x_i$  можно представить в виде линейной функции нескольких переменных

$$Y_p = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_kx_k. \quad (2.33)$$

Уравнение (2.33) будет уравнением прямой при  $k = 1$ , уравнением плоскости при  $k = 2$ , уравнением гиперплоскости при  $k > 2$ . Достаточно большой объем вычислительных работ может быть существенно уменьшен при переходе от натурального к безразмерному масштабу.

Нормирование проводится по формулам (2.34) и (2.35) для всех случайных величин  $x$  и  $y$

$$y_{i0} = (y_i - y_{cp})/S_y; \quad (2.34)$$

$$x_{ij0} = (x_{ij} - x_{jcp})/S_{xj}, \quad (2.35)$$

где  $y_{i0}$ ,  $x_{ij0}$  — нормированные значения соответствующих признаков  $X_j$  и  $Y$ ;  $y_{cp}$ ,  $x_{jcp}$  — средние значения признаков;  $S_y$ ,  $S_{xj}$  — среднеквадратичные отклонения признаков.

В таком случае в новом масштабе средние величины  $x_0$  и  $y_0$  равны нулю, а их среднеквадратичные отклонения — единице

$$y_0 = 0; x_{j0} = 0; S_{y0} = 1; S_{xj0} = 1.$$

Выборочные коэффициенты корреляции нормированных величин вычисляют по достаточно простым формулам, причем можно определить не только коэффициенты корреляции между  $y$  и  $x_j$  по уравнению (2.36), но и по формуле (2.37) найти тесноту взаимосвязи между самими входными переменными  $x_i$  и  $x_j$  — так называемыми коэффициентами парной корреляции

$$r(x_{j0}, y_0) = 1/(n-1) \cdot \sum x_{ji0}y_{i0}; \quad (2.36)$$

$$r(x_{j0}, x_{m0}) = 1/(n-1) \cdot \sum x_{ji0}x_{mi0}. \quad (2.37)$$

Вычисленные по данным формулам коэффициенты корреляции равны соответствующим коэффициентам в натуральном масштабе. Но для вычисления коэффициентов  $b_0, b_1 \dots b_k$  уравнения (2.33) этого недостаточно.

[illegible]

В результате решения системы уравнений (2.38) получают искомые коэффициенты  $a_i$ , с помощью которых строится уравнение регрессии между нормированными величинами, свободного члена у него нет,

$$y_0 = a_1 x_{01} + a_2 x_{02} + a_3 x_{03} + \dots + a_k x_{0k}. \quad (2.39)$$

При помощи уравнения (2.39) можно в обобщенной форме оценить влияние каждого из факторов на нормированное значение  $y_0$ . Анализ коэффициентов уравнения позволяет как бы «взвесить» влияние физически абсолютно разнородных факторов на исследуемый параметр. В итоге становится возможным проведение ранжирования воздействующих факторов и выделение наиболее и наименее значимых.

$$b_i = a_i (S_v/S_{xi}); \quad (2.40)$$

Сводный, или множественный, коэффициент корреляции определяют по формуле (2.42) через выборочные коэффициенты корреляции и найденные ранее величины  $a_i$

$$R = \sqrt{\sum a_i r(y, x_j)}. \quad (2.42)$$

Полученное значение множественного коэффициента корреляции должно совпасть с коэффициентом корреляции между экспериментально полученными значениями.

Проверку гипотезы о значимости множественного коэффициента корреляции осуществляют по расчетному критерию Фишера

$$F_p = \frac{S_{\text{неад}}^2}{S_y^2}. \quad (2.43)$$

Полученный по формуле (2.43) расчетный критерий Фишера сравнивают с табличным значением  $F_t$  для выбранного уровня значимости  $\alpha$  и степеней свободы  $f_1$  и  $f_2$ . Если отношение  $F_t/F_p$  больше 20, то полученная зависимость  $y = f(x_j)$  адекватно описывает массив экспериментальных данных.

Подводя итог, можно отметить, что для построения регрессионных уравнений реальных процессов пользуются корреляционно-регрессионным анализом, дополняемым при необходимости дисперсионным или кластерным анализом.

Отыскание уравнения регрессии для большого числа опытов (сотни и тысячи) и достаточно большого количества переменных (несколько десятков) представляет объемную по вычислениям и требующую большого внимания математическую задачу. С появлением специальных компьютерных программ задача множественной линейной корреляции несколько упростилась, но составление корреляционных матриц для решения систем нормальных уравнений требует ручного исполнения для каждого конкретного варианта.



## ГЛАВА 3.

### Основы теории ошибок

---

#### Основные сведения о единицах физических величин

---

Для адекватного математического описания какого-либо реального процесса необходимо задаться вопросом, какова точность измерения физических величин в проводимых опытах и как учесть неизбежно возникающие в процессе измерения ошибки. Для этого следует вспомнить единицы физических величин и их размерности. В 1948 г. на IX Генеральной конференции по мерам и весам было предложено принять единую систему единиц. После официальных опросов мнений специалистов научных, педагогических, технических кругов в качестве основных единиц были приняты метр, килограмм, секунда, сила тока — ампер, градус термодинамический — кельвин, сила света — кандела. В 1960 г. данная система была принята XI Генеральной конференцией по мерам и весам в качестве международной, сокращенно SI (СИ в русской транскрипции). В СССР система СИ введена с 1963 г. как предпочтительная, в настоящее время действует единый Госстандарт ГОСТ 8.417–81 «ГСИ. Единицы физических величин». В 1971 г. СИ была дополнена единицей количества вещества — молем.

Основные единицы системы СИ следующие.

Единица длины — *метр* — расстояние, проходимое светом в вакууме за  $1/299\,792\,458$  долю секунды.

Единица массы — *килограмм* — масса, равная массе международного прототипа килограмма.

Единица времени — *секунда* — время, равное 9 192 613 770 периодам излучения, соответствующего переходу между двумя сверхтонкими уровнями основного состояния атома цезия-133.

Единица силы электрического тока — *ампер* (*A*) — сила неизменяющегося тока, который при движении по двум параллельным проводникам бесконечной длины и бесконечно малого кругового сечения, расположенным в вакууме на расстоянии 1 м, вызывал бы силу взаимодействия между этими проводниками  $2 \cdot 10^{-7}$  Н на каждый метр длины.

Единица температуры — *кельвин* —  $1/273,16$  часть термодинамической температуры тройной точки воды.

Единица силы света — *кандела* (*кд*) — сила света в заданном направлении источника монохроматического излучения частотой  $5,4 \cdot 10^{14}$  Гц с энергией  $1/683$  Вт/ср.

Единица количества вещества — *моль* — количество вещества системы, содержащей столько же структурных элементов, сколько содержится атомов в нуклиде  $C^{12}$  массой 0,012 кг. При применении моля структурные элементы должны быть специфицированы — могут быть атомами, ионами, молекулами, элементарными частицами или иными группами частиц.

Кроме основных, имеются и дополнительные единицы СИ, не зависящие от размера основных единиц. Это угловые меры плоского и телесного углов — радиан (*рад*) и стерadian (*ср*). Один стерadian равен телесному углу с вершиной в центре сферы, вырезающему на поверхности сферы площадь, равную площади квадрата со стороной, равной радиусу сферы.

Производные единиц СИ образуются на основании законов, связывающих определенные физические величины или на основании определений физических величин через основные единицы.

Производные единицы механических величин известны из курсов общей физики, сопротивления материалов, теоре-

тической и прикладной механики — скорость, ускорение, сила, импульс, момент инерции и т. д.

Для металловедов представляют интерес внесистемные единицы температуры. Перевод градусов Цельсия в градусы Кельвина, Реомюра, Фаренгейта осуществляют по формуле (3.1)

$$tC/5 = (t - 273)K/5 = tR/4 = (t - 32)F/9. \quad (3.1)$$

В практике рентгеноструктурного анализа встречаются единицы длины — ангстрем (Å) —  $10^{-9}$  м, в металлографии — микрон (микрометр), равный  $10^{-6}$  м. При взвешивании благородных металлов ювелирами применяется внесистемная единица — карат. Величина карата 0,2 г.

Размерность физических величин определяется из физических уравнений, связывающих основные и производные единицы, и дает представление о природе величины относительно основных единиц, т. е. является качественной величиной.

Размерность не определяет характер величин. Работа (энергия) и момент силы по размерности одинаковы [ $\text{кг} \cdot \text{м}^2/\text{с}^2$ ], но определяют совершенно различные физические понятия. Понятие размерности приносит большую пользу при проверке сложных формул и выводе уравнений — несоответствие размерностей правых и левых частей полученного в результате расчетов уравнения говорит о неучтенном размерном коэффициенте или допущенной грубой ошибке.

Кратные и дольные единицы позволяют привести измеряемые величины в доступный формат. Зачастую единицы СИ весьма неудобны — или очень велики или малы. Например, полная электрическая емкость шара диаметром с Землю будет всего несколько фарад. Применяются кратные десятой степени приставки, означающие, во сколько раз следует изменить измеряемую величину. Ниже приведены названия приставок и их краткие обозначения:

экса (Э) —  $10^{18}$ , пета (П) —  $10^{15}$ , тера (Т) —  $10^{12}$ , гига (Г) —  $10^9$ ,  
мега (М) —  $10^6$ , кило (к) —  $10^3$ , гекто (г) —  $10^2$ , дека (да) —  $10^1$ ,  
деци (д) —  $10^{-1}$ , санти (с) —  $10^{-2}$ , милли (м) —  $10^{-3}$ , микро (мк) —  $10^{-6}$ ,  
нано (н) —  $10^{-9}$ , пико (п) —  $10^{-12}$ , фемто (ф) —  $10^{-15}$ , атто —  $10^{-18}$ .

Присоединение двух и более приставок не допускается. Неправильно относить приставку к исходной единице, возведенной в степень, например  $1 \text{ км}^2$ , а не  $1 \text{ Мм}^2$ . Приставки применяются в большинстве случаев так, чтобы числовые значения величин находились в диапазоне  $10^{-2} \dots 10^3$ , но обычно выбирают кратные величины, приводящие к значениям, приемлемым на практике.

Сохранились особые дольные и кратные единицы. Например, единицы времени (не десятичные) — минуты, часы, дни, месяцы; единицы массы в сельском хозяйстве — пуды, тонны; угловые меры — градусы, тысячные (в военном деле) и др.

К внесистемным единицам, употребление которых разрешено без ограничения срока, причисляют относительные и логарифмические единицы и величины.

*Относительная величина* — безразмерное отношение физической величины к одноименной физической величине, принимаемой за исходную — относительное удлинение, относительная плотность, относительная диэлектрическая и магнитная проницаемость, относительная масса химических элементов (атомный вес) и т. д. Данные величины могут измеряться в безразмерных единицах или процентах. Нередко содержание химических элементов в сплаве может быть выражено в промилле,  $1 \text{ pt} = 10^{-3}$ , или миллионных долях — пропромилле,  $1 \text{ ppm} = 10^{-6}$ .

Логарифмическая величина представляет собой логарифм (десятичный, натуральный, по основанию 2) отношения двух одноименных физических величин. Применяется для уровней звукового давления, усиления, ослабления и т. д. Единицей является бел (Б). Дольной единицей от бела является децибел (дБ).

Например, сила звукового давления взлетающего реактивного самолета на расстоянии 10 м составляет 120...130 дБ, что близко к болевому порогу человека.

## **Виды измерений и погрешностей**

Измерения делятся по способу получения результата на прямые (непосредственные), которые отсчитывают прямо по прибору, и косвенные, при которых исследуемая величина вычисляется как функция по результатам измерений других величин.

По методу измерений последние делятся на абсолютные, когда величина фиксируется в аналоговом или дискретном виде; и пороговые, когда исследуемая величина фиксируется в двухстороннем или одностороннем допуске по принципу «да — нет».

По условиям измерений измерения делятся на равноточные, т. е. проводящиеся в одинаковых условиях, влияющих на точность измерений, и неравноточные. По степени достаточности измерений последние делятся на необходимые и избыточные, т. е. содержащие большее число измерений или большую точность, наличие других измеряемых величин и т. д.

Классификация видов погрешностей по форме числового выражения такова:

- 1) абсолютная погрешность — алгебраическая разность между результатом измерения искомой величины и ее истинным значением, выраженная в единицах измерения;
- 2) относительная погрешность — погрешность, приходящаяся на единицу измеряемой величины; обычно выражается в процентах;
- 3) приведенная погрешность — полученная погрешность относится к максимально возможному значению шкалы прибора; обычно выражается в процентах.

Классификация видов погрешностей по закономерности проявления:

- 1) случайная погрешность — погрешность, в отдельных измерениях принимающая случайные, заранее неизвестные значения. В большинстве измерений известны числовые характеристики закона распределения погрешности измерений;
- 2) систематические погрешности — постоянные либо меняющиеся по какому-либо закону от независимой переменной и поэтому заранее известные погрешности. Заранее определенная систематическая погрешность называется поправкой;
- 3) грубые погрешности (промахи) — просчет оператора, неисправность прибора, неучет изменившихся внешних условий и т. д. Промахи при обработке результатов измерений необходимо исключать. Это производится с помощью критериев Шовене, Романовского, Ирвина, Стьюдента.

Классификация видов погрешностей по возможности (вероятности) реализации:

- 1) предельная погрешность — такая погрешность, которая характеризует совокупность случайной и систематической погрешностей и с определенной долей вероятности максимально возможную погрешность;
- 2) среднеквадратичная (стандартная) погрешность — вычисляется по известным формулам для среднеквадратичного отклонения ( $\sigma$ );
- 3) вероятная погрешность — такая величина по модулю, относительно которой реализации случайных погрешностей равновозможны. Для нормального распределения применима формула (3.2)

$$r = (2/3)\sigma; \quad (3.2)$$

- 4) средняя погрешность — среднее от суммы модулей погрешностей;
- 5) средняя арифметическая погрешность — среднее от суммы погрешностей. Для нормального распределения погрешностей весьма велика вероятность равенства ее нулю.

Оценка среднеквадратичного отклонения случайной погрешности производится по  $n$  измерениям эталонной детерминированной величины по формулам оценки дисперсии. Для получения значимых с определенной точностью данных должна быть обеспечена представительная выборка.

Средства измерения подразделяются по характеристикам точности:

- 1) класс точности — значение допустимой приведенной относительной погрешности, выраженной в процентах (0,2; 1,0; 5,0; ...);
- 2) чувствительность — отношение приращения измеряемой величины  $dQ$  к изменению отклонения индикаторов прибора  $dh$ , определяется по формуле (3.3)

$$S = dQ/dh; \quad (3.3)$$

- 3) порог чувствительности — наименьшее значение измеряемой величины, способное вызвать заметные отклонения индикатора прибора;
- 4) разрешающая способность — минимальное изменение измеряемой величины, которое может быть зафиксировано прибором и оператором. Порог чувствительности отличается от разрешающей способности наличием человеческого фактора.

По соотношению случайной и систематической погрешностей определяется подход к производимым измерениям. Если систематическая является определяющей (существенно больше случайной), то измерения достаточно провести только 1 раз, например, при измерении линейкой правильной геометрической фигуры. Если же случайная ошибка много больше — необходи-

мо несколько измерений и число измерений выбирается таким образом, чтобы случайная погрешность среднего арифметического была меньше систематической погрешности.

Зачастую систематическая погрешность не может быть определена с большой точностью, например, погрешность измерительного прибора определяется его классом точности, что дает при измерении некоторое «размытие» измеренной величины. В таком случае целесообразно систематическую погрешность перевести в случайную, учитывая ее так же, как дополнительный случайный фактор. Но делать это следует только при невозможности иной оценки систематической погрешности и ни в коем случае не считать ее случайной, если поправка может быть точно рассчитана.

### Закон сложения случайных погрешностей

Пусть измеряемая величина  $Z$  является суммой (разностью) некоторых случайных величин  $X$  и  $Y$ , результаты измерения которых независимы, тогда дисперсия величины  $Z$  будет равна сумме дисперсий величин  $X$  и  $Y$ , а среднеквадратичное отклонение рассчитывается по формуле (3.4)

$$S_z = \sqrt{\sum S_i^2}. \quad (3.4)$$

Из закона сложения погрешностей следует, что вклад отдельных погрешностей в общую погрешность очень быстро падает с относительным их уменьшением.

Пусть погрешность одного из слагаемых вдвое больше другого, тогда по формуле (3.5)

$$S_z = \sqrt{\sum S_i^2} = \sqrt{S_x^2 + \frac{S_x^2}{4}} = 1,1S_x, \quad (3.5)$$



вклад меньшей погрешности составляет порядка 10 %. С увеличением отношения погрешностей вклад меньшей погрешности еще больше упадет. Следовательно, при минимизации суммарной погрешности следует уменьшать самую большую погрешность.

Другой вывод касается оценки погрешности при некотором числе равноточных измерений. Среднеквадратичная погрешность среднего арифметического равна среднеквадратичной погрешности измерений, деленной на корень квадратный из числа измерений по формуле (3.6)

$$S = \frac{S_x}{\sqrt{n}}, \quad (3.6)$$

т. е. для повышения точности измерения какой-либо величины в 5 раз следует провести 25 измерений. Например, производится взвешивание некоторой массы, состоящей из 100 образцов с точностью 50 мг. В таком случае общая погрешность в определении данной массы составит  $50 \cdot (100)^{1/2} = 500 \text{ мг} = 0,5 \text{ г}$ . Это реальная оценка возможной ошибки, и неправильно оценивать суммарную погрешность как  $50 \cdot (100)$  — сумму максимальных погрешностей каждого из измерений, хотя иногда применяется и такой подход. Это требование не оправдано по теории вероятностей.

Если предположить, что погрешности измерения отличаются только знаком и появление их равновероятно, то вероятность появления максимальной погрешности при  $n$  измерениях будет равна  $(1/2)^n$  и при 100 измерениях будет выражаться числом порядка  $2 \cdot 10^{-30}$ , что практически равно нулю. Следовательно, ни при каких обстоятельствах общая ошибка подобных измерений не будет равна  $50 \text{ мг} \cdot 100 = 5 \text{ г}$ .

При нахождении погрешности разности двух величин  $X$  и  $Y$  следует учитывать, что относительная погрешность возрастает с уменьшением модуля разности  $|x - y|$ , тогда как погрешность суммы не зависит от соотношения величин. Это обстоятель-

ство весьма важно при численном дифференцировании полученных экспериментальных зависимостей. Для уменьшения относительной ошибки значения производной, следует брать достаточно большой интервал изменения аргумента.

Для характеристики точности применяемого способа измерений следует пользоваться среднеквадратичной погрешностью отдельного измерения. В таком случае для различного числа измерений и выбранного доверительного интервала можно получить измеряемую величину с той или иной погрешностью. На практике редко доверительный интервал расширяют более чем до 90...95 %, но при проведении особо точных измерений он может достигать 99 или даже 99,99 %. Определенная с помощью критерия Стьюдента погрешность сама подчиняется особому распределению — хи-квадрат распределению, которое зависит только от числа измерений и очень асимметрично для малых  $n$ . Если обозначить погрешность погрешности  $Ss_x$ , то по формуле (3.7) она будет найдена как

$$Ss_x = \frac{S_x}{\sqrt{2(n-1)}}, \quad (3.7)$$

для малого числа опытов (менее 40) следует пользоваться специальными таблицами из учебников по теории вероятностей.

Из определения величины погрешности следуют правила округления полученной величины. Оценив относительную величину погрешности, можно прийти к выводу, что записывать полученную ошибку с точностью менее 10 % нельзя, т. к. она определяется более грубо. В большинстве случаев на практике величина погрешности округляется до одной значащей цифры, а следовательно, величина основного измерения — с точностью до полученной погрешности.

Сравнением погрешностей занимается специальная дисциплина — дисперсионный анализ. По величине дисперсий двух выборок различного объема можно сделать вывод о принадлежности выборок к одной генеральной совокупности и объедине-

нии данных выборок в одну более представительную, что дает возможность уменьшить расчетную погрешность. Например, именно по различию в плотности азота атмосферного воздуха и азота, полученного из аммиака, порядка 0,5 % в конце XIX в. английскими физиками Релеем и Рамсаем был открыт первый из инертных газов — аргон. Однако статистический анализ полученных результатов был проведен значительно позже.

Пусть для двух рядов измерений одной и той же величины  $X$  получены средние значения  $x_1$  и  $x_2$  из  $n_1$  и  $n_2$  измерений соответственно. Следует определить, когда можно считать расхождение между  $x_1$  и  $x_2$  значимым, а когда — случайным. Для этого следует определить, насколько значимо отличается от нуля модуль разности полученных величин  $x_1$  и  $x_2$ . Определим дисперсии для  $x_1$  и  $x_2$ , а дисперсию разности вычислим по формуле (3.8)

$$S^2 = ((n_2 - 1)S_1^2 + (n_1 - 1)S_2^2)/(n_1 + n_2 - 2). \quad (3.8)$$

Критерий Стьюдента для подобной выборки составит

$$t_p = |\bar{x}_1 - \bar{x}_2|/S(n_1 n_2 / (n_1 + n_2))^{1/2}. \quad (3.9)$$

Полученный по формуле (3.9)  $t$ -критерий следует сравнить с табличным значением критерия Стьюдента для выбранного уровня значимости  $\alpha$  и числа степеней свободы  $n_1 + n_2 - 1$ . Если  $t < t_{\text{табл}}$ , то принимается гипотеза о незначимости различия определений средних, в противном случае — отвергается и результаты измерений являются неслучайно отличными друг от друга.

Для этого же примера воспользуемся критерием Романовского  $R$ . Если  $R > 3$ , то расхождение между величинами существенно, менее 3 — несущественно (для уровня значимости 0,003), вычислим его по формуле (3.10)

$$R = t/S_t, \quad S_t = ((n_1 + n_2 - 2)/(n_1 + n_2 - 4))^{1/2},$$

$$R = 0,25/1,034 < 3. \quad (3.10)$$

В случае, если заранее известна генеральная дисперсия совокупностей  $X_1$  и  $X_2$ , то общая дисперсия рассчитывается для выборок объема  $n_1$  и  $n_2$  рассчитывается по формуле (3.11)

$$\sigma = \sigma_1/n_1 + \sigma_2/n_2. \quad (3.11)$$

Задаваясь тем или иным уровнем значимости, можно определить случайно или неслучайно различаются полученные средние. Но реализовать данный случай удастся редко.

### Погрешности косвенных измерений

В большинстве случаев мы имеем дело с косвенными измерениями, когда определяемая величина сама зависит от других (прямых) измерений, например, определение объема, плотности тел, удельного электрического сопротивления и т.д. Поскольку обычно определяемая величина связана с прямыми измерениями функциональной связью, для определения погрешности измерений следует воспользоваться понятием полного дифференциала функции нескольких переменных.

Если  $Z = f(x, y)$ , то полный дифференциал от  $Z$  по формуле (3.12) составит

$$dZ = \left( \frac{\partial Z}{\partial x} \right) dx + \left( \frac{\partial Z}{\partial y} \right) dy. \quad (3.12)$$

При переходе к конечным разностям получим уравнение (3.13)

$$\Delta Z = Z'_x \Delta x + Z'_y \Delta y. \quad (3.13)$$

Такое определение полного приращения очень жестко и не проходит по критериям теории вероятности. В теории ошибок принято величину полной погрешности независимых измерений оценивать в соответствии с уравнением (3.14)

$$\Delta Z = \sqrt{\sum \left( \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right)^2 \Delta x_i^2}. \quad (3.14)$$

Данная формула выполняется всегда, подставляются ли в нее значения среднеквадратичных генеральных дисперсий, среднеквадратические погрешности  $S_n$  или среднеарифметические  $S_m$  погрешности. На основании этой формулы можно вычислить общую погрешность косвенного измерения любой физической величины.

### Учет систематических и случайных погрешностей

Не всегда можно случайную ошибку сделать соизмеримой с систематической: либо необходимо сделать очень большое число измерений, что невозможно из-за больших затрат времени и высокой стоимости, либо это просто нецелесообразно.

Измерение силы тока амперметром, имеющим класс точности 1, а наибольшее значение шкалы составляет 1 А, позволит определить величину тока не лучше 10 мА. Следовательно, не зная свойств данного прибора, ничего нельзя сказать о вероятности погрешности  $-5$  мА или  $+7$  мА. Известна только верхняя граница возможных погрешностей — 10 мА. К данной систематической погрешности присоединяется случайная, и вероятность вычисления суммарной погрешности неопределенна, но можно оценить значение верхнего предела погрешности. Для этого применяют метод рандомизации-перемешивания.

Приняв доверительную вероятность вычисления среднеквадратичного отклонения 95 %, получим формулу (3.15)

$$S = \delta + 2\sigma, \quad (3.15)$$

где  $\delta$  — систематическая погрешность;  $\sigma$  — среднеквадратичное отклонение.

Вопрос о сложении систематической и случайной погрешностей актуален только в тех случаях, если соотношение  $\delta/(n\sigma)$  порядка 1...3. В противном случае в качестве меры погрешности измерения указывают только большую погрешность.

Иногда систематическую и случайную погрешности указывают порознь, если неизвестны законы распределения случайной погрешности. Если же предположить, что закон распределения случайной погрешности нормальный, то суммарную погрешность можно записать в виде формулы (3.16)

$$S = \sqrt{\sum S_i^2} = \sqrt{\delta^2 + (n\sigma)^2} \quad (3.16)$$

или в общем виде (3.17), если систематических погрешностей несколько ( $\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_n$ ),

$$S = \sqrt{\sum S_i^2} = \sqrt{\sum \delta_i^2 + (n\sigma)^2}. \quad (3.17)$$

Число измерений, необходимых для получения заданной погрешности, т. е. чтобы доверительный интервал случайной погрешности был сравним или существенно меньше систематической погрешности (в 2...5 раз), можно осуществить, если при первичных измерениях случайная ошибка не более чем в 4...5 раз превышает систематическую. При больших соотношениях число измерений стремится к тысячам, поэтому необходимо менять методику получения данных.

## ГЛАВА 4.

### Математическое планирование эксперимента

---

#### Основные виды экспериментальных исследований

---

**В** качестве объекта исследования может выступать действующий промышленный объект, полупромышленная опытная установка и физическая модель. Внешними по отношению к объекту воздействия оказываются переменные трех видов:

- 1) наблюдаемые и управляемые исследователем входы ( $x_1, x_2, \dots, x_k$ ) — технологические факторы. К ним также относятся технические и организационные факторы;
- 2) наблюдаемые, но неуправляемые входы ( $v$ );
- 3) ненаблюдаемые и неуправляемые входы ( $u$ ).

На рис. 4.1 приведена схема воздействия на объект для переменных трех перечисленных видов, а также ряд выходов  $y_i$ .

Входы типа  $v_i$  и  $u_i$  являются возмущениями (помехами, шумами), поскольку они воздействуют на объект независимым от исследователя образом. На оказываемые извне воздействия объект реагирует путем изменения параметров своего состояния, называемых выходами, или откликами.

*Отклик* — количественная величина, характеризующая процесс или свойство объекта исследования.

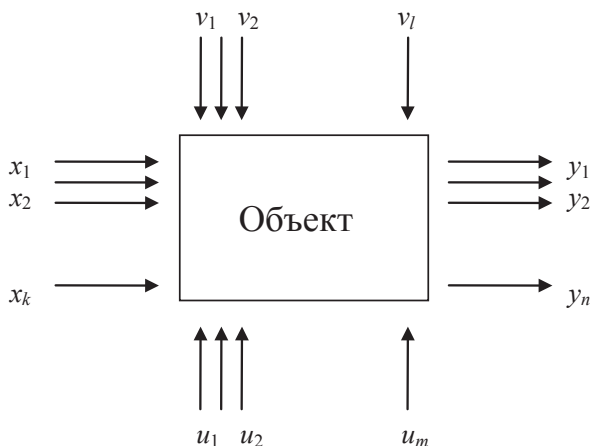


Рис. 4.1. Схема воздействия на объект управляемых переменных ( $x_i$ ) и помех ( $v_i, u_i$ )

*Фактор* — переменная, количественно описывающая один из способов внешнего воздействия на объект исследования и по предположению влияющая на отклик.

Под *экспериментом* часто понимают метод познания, при помощи которого в наблюдаемых и управляемых условиях исследуются явления и процессы действительности. Эксперимент является одной из форм практики и выполняет функцию истинности научного познания. В более узком плане эксперимент служит для проверки гипотез.

При пассивном эксперименте исследователь не вмешивается в работу объекта, следя лишь за тем, чтобы его физические или иные параметры в процессе неизбежных случайных колебаний не выходили за установленные пределы. Непосредственной задачей исследователя является сбор численных значений входов и выходов объекта в виде достаточно больших массивов информации, накапливаемых за значительный интервал времени. Собранные данные затем подвергаются специальной обработке с использованием методов математической статистики.



При активном эксперименте исследователь сознательно по определенному плану варьирует факторы, собирает данные о реакции выходов на входные воздействия, после чего также производит статистическую обработку полученных результатов опытов. Активный эксперимент всегда подразумевает планирование.

*Планирование эксперимента* — процедура выбора числа опытов и условий их проведения, необходимых и достаточных для решения поставленной задачи с требуемой точностью. По цели активный эксперимент делится:

- 1) на интерполяционный эксперимент, цель которого — получить зависимость вида  $y = f(x_i, v_i) + \Sigma_k$ , где  $\Sigma_k$  — ошибка эксперимента, учитывающая возможное влияние на контролируемый фактор;
- 2) экстремальный (поисковый) эксперимент, цель которого — поиск такого сочетания факторов, при котором отклик достигает экстремума, т. е. максимума или минимума.

По цели эксперимент делят на качественный и количественный. Цель качественного эксперимента — установить факт существования явления. Цель количественного эксперимента — сформировать математическую модель явления, т. е. систему соотношения между количественными характеристиками факторов (внешних воздействий) и количественными характеристиками конечного явления.

## Поиск оптимальных условий

Модели многофакторных процессов в большинстве являются «черным ящиком», и для их создания при случайной постановке опытов (случайном изменении влияющих факторов) требуется большой объем вычислений на стадии обработки результатов. Такого рода совокупность опытов является пас-

сивным экспериментом. Полученная в результате пассивного эксперимента модель зачастую не отвечает на вопрос, каким условиям отвечает область оптимума.

В 20-х гг. XX в. английский математик Рональд Фишер при постановке эксперимента предложил одновременное варьирование всех факторов по определенной схеме. Такой эксперимент называли активным, или экстремальным.

Суть активного эксперимента состоит в том, что по заранее определенным правилам проводятся небольшие серии опытов, после обработки результатов которых планируются условия проведения следующей серии. Двигаясь шаг за шагом, достигают области оптимума.

Цель эксперимента состоит в поиске экстремума некоторой функции. Ее называют целевой. В качестве примера можно привести задачу по выбору оптимального состава жаропрочной стали (оптимальное содержание  $C - Ni - Cr - Ti$ ), температурно-временных параметров термообработки в целях получения заданного комплекса механических свойств (температура закалки, отпуска, их продолжительность), условий проведения химико-термической обработки для получения слоя заданной толщины и состава за минимальное время обработки и т. д.

В общем случае данный метод абсолютно применим при поиске оптимальных условий для достижения заданных свойств — решении задач оптимизации.

## **Факторы и параметры оптимизации**

---

*Планирование эксперимента* — процедура выбора числа и условий проведения опытов, необходимых и достаточных для решения поставленной задачи с требуемой точностью. Изучаемая зависимая переменная  $Y$  называется параметром опти-

мизации, а воздействующие на нее независимые переменные  $X_i$  — факторами.

В результате эксперимента строится математическая модель (4.1), которая представляет собой некоторую функцию отклика от независимых переменных — факторов, а в каждом из опытов реализуется отклик параметра оптимизации.

$$Y = F(X_1, X_2, \dots, X_n). \quad (4.1)$$

Необходимо тщательно проводить процедуру выбора факторов и их числа, т. к. пропущенный хотя бы один сильно влияющий фактор способен сделать проведение эксперимента бесполезным. Факторы могут быть количественными или качественными (принцип «есть — нет»).

Требования к факторам:

- 1) факторы должны быть управляемыми, т. е. полностью регулироваться исследователем;
- 2) точность замера факторов должна быть возможно более высокой для возможно более адекватного описания параметра оптимизации;
- 3) факторы должны быть однозначны, но могут быть сложными — соотношения между компонентами, градиенты, скорости и т. д. Надо стараться выбирать достаточно легко варьируемые факторы (не скорость диффузии);
- 4) совокупность факторов должна быть совместимой, все их комбинации осуществимы и безопасны;
- 5) факторы должны быть независимы или в крайнем случае линейно некоррелированы.

Параметр оптимизации должен быть эффективным с точки зрения достижения цели, универсальным (достаточно широко применяемым и всесторонне характеризующим объект), количественным, выражаться одним числом, статистически эффективным (легкость определения статистических моментов), иметь физический смысл, быть простым и легко вычисляемым, существовать для всех заданных состояний факторов.

Выполнение одновременно всех заданных свойств бывает трудно осуществимо и на практике идут на определенные компромиссы, например, сужают требование универсальности при решении узкотехнологических задач.

Нередко задача ставится так, что требуется обеспечить выполнение нескольких выходных параметров одновременно. Но одновременно оптимизировать несколько функций невозможно. Функцию отклика находят в этом случае для наиболее важного параметра с точки зрения оптимизации, налагая на остальные параметры ограничения. Например, необходимо получить наиболее высокую прочность сплава при обеспечении технологичности его производства и невысокой стоимости — накладываются реальные ограничения на технологические факторы (температура, длительность процесса, содержание легирующих элементов и их стоимость). Следовательно, необходимо вести поиск оптимума, одновременно решая систему неравенств, — это задачи линейного программирования (программируемого линейного поиска).

Число значимых выходных параметров необходимо уменьшать, для чего пользуются корреляционным анализом. Для этого находят коэффициент корреляции по формуле Пирсона между возможными парами выходных параметров для данных факторов и сравнивают с критическими значениями  $r_{кр}$  в зависимости от числа проведенных опытов и уровня значимости (0,05 или 0,01). Ниже приведены критические значения парных коэффициентов корреляции выходных параметров  $y_i$  и  $y_j$  при уровне значимости  $\alpha = 0,05$ :

$N - 2$	1	3	5	10	20	50
$r_{кр}$	0,997	0,88	0,75	0,58	0,42	0,27

Если найденное значение  $r$  меньше  $r_{кр}$ , то с доверительной вероятностью 95 % тесная линейная связь между выходными параметрами отсутствует. При высокой значимости вычислен-

ного коэффициента корреляции любой из анализируемых параметров можно исключить, обычно тот, который труднее измерять или физический смысл которого менее ясен.

Возможно соединение нескольких параметров в один обобщенный по какой-либо функциональной зависимости, приводящей к безразмерной величине. Для этого пользуются следующими способами.

Можно ввести простейшее преобразование: для каждого из полученных откликов  $y_k$  задать шкалу с двумя значениями 0 и 1; 0 соответствует неудовлетворительному качеству; 1 — годный продукт. Стандартизовав таким образом частные отклики, возьмем для обобщенного отклика среднее геометрическое

$$Y_0 = \sqrt[r]{\prod y_k}, \quad (4.2)$$

и в итоге, чем раньше в формуле (4.2) получим единицу, тем быстрее достигнем оптимума. Однако такой подход слишком груб, и поиск может затянуться на неопределенное время.

Если для каждого из частных откликов известно идеальное значение  $y_{k0}$ , к которому необходимо стремиться, то можно найти степень отклонения каждого из откликов в относительной безразмерной величине  $\frac{(y_{ki} - y_{k0})}{y_{k0}}$ , и тогда для обобщенного отклика пригодна следующая формула

$$Y_i = \sum \left( \frac{y_{ki} - y_{k0}}{y_{k0}} \right)^2. \quad (4.3)$$

Для нивелировки знаков, в формуле (4.3) взяли квадраты. Естественно, что чем ближе к идеалу будут значения частных откликов, тем меньше будет их сумма квадратов. При таком подходе надо определить, что считать за нижнюю допустимую границу, если верхняя равна нулю (например, 10...20 % отклонения).

На практике различные параметры неравноправны, и для определения действительного веса каждого из них необходимо в формуле (4.3) ввести ранжирование — определение важности полученных откликов по каким-либо предпосылкам. В этом случае расчет производится по формулам (4.4) и (4.5)

$$Y_i = \sum a_k \left( \frac{y_{ki} - y_{k0}}{y_{k0}} \right)^2, \quad (4.4)$$

$$\sum a_k = 1, a_k \geq 0. \quad (4.5)$$

Наиболее широко распространена система экспертных оценок в определении значений  $a_k$ . Если эксперты затрудняются дать определенную оценку для того или иного частного отклика, то применяется обобщенная функция желательности Харрингтона:

Желательность	Шкала
очень хорошо	1 ... 0,8
хорошо	0,8 ... 0,63
удовлетворительно	0,63 ... 0,37
плохо	0,37 ... 0,2
очень плохо	0,2 ... 0

Она предназначена для установления соответствия между психологическими и физическими параметрами.

Значения частного отклика переводят в безразмерную шкалу желательности — частную желательность  $d$  (*desirable* — от англ. «желательный»); каждому значению частного отклика можно поставить в однозначное соответствие определенную частную желательность  $d$

$$d = \exp(-\exp(-y')), \quad (4.6)$$

где значению  $y'$  приписывается в безразмерном виде интервалов изменение отклика от «очень хорошо» до «очень плохо».

Такой вид функции в формуле (4.6) выбран потому, что она непрерывная, монотонная, гладкая и обладает наибольшей чувствительностью в середине зоны относительно краев.

После данной операции, в зависимости от ограничения полученного свойства (с одной стороны или с обеих), производят по номограмме определение частной желательности и вычисляют обобщенную желательность как среднее геометрическое от частных желательностей. При невозможности иного подхода следует пользоваться функцией Харрингтона, которая является количественным, однозначным, единым и универсальным показателем качества объекта.

## Постановка задачи при планировании эксперимента

---

Предполагается, что существует  $n$ -мерное факторное пространство, в котором определена некоторая функция отклика

$$Y = F(X_1, X_2, \dots, X_n). \quad (4.7)$$

Предполагается, что зависимость функции (4.7) от факторов носит экстремальный характер, при этом вид функции неизвестен. Требуется найти точки экстремума. При описании поверхности отклика используют полином второй степени вида

$$y = b_0 + \sum b_{0i} \cdot X_i + \sum b_{0ij} \cdot X_i X_j + \sum b_{0ii} \cdot X_i^2. \quad (4.8)$$

Существует бесконечное множество точек (опытов) в факторном пространстве. Для нахождения коэффициентов  $b$  в формуле (4.8) необходимо знать генеральную совокупность значений этих факторов. Пусть  $y$  — выборочное значение функции отклика

$$y = b_0 + \sum b_i \cdot X_i + \sum b_{ij} \cdot X_i X_j + \sum b_{ii} \cdot X_i^2, \quad (4.9)$$

где  $b_0$  — свободный член уравнения — оценка коэффициента  $b_0$  производится путем аппроксимации поверхности отклика полиномом 2-й степени и варьирования факторов на 2-х уровнях;  $b_i$  — коэффициент регрессии при линейных эффектах (факторах);  $b_{ij}$  — коэффициент регрессии при взаимодействующих эффектах (произведение факторов);  $b_{ii}$  — коэффициент регрессии при квадратичных факторах.

Планирование эксперимента предполагает поэтапное решение задачи по нахождению адекватной функции отклика. На первом этапе строится линейная модель, позволяющая выявить силу и направление (знак) влияния, после чего уточняется центр эксперимента и модель дополняется нелинейными взаимодействиями.

В линейной модели рассматривается уравнение вида

$$y = b_0 + b_i \cdot X_i. \quad (4.10)$$

Для модели с двумя значимыми факторами

$$y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2. \quad (4.11)$$

Сила влияния фактора в формулах (4.9), (4.10) и (4.11) определяется модулем коэффициента при данном факторе: чем больше величина модуля, тем сильнее он влияет на параметр оптимизации. Знак коэффициента определяет влияние фактора: если коэффициент положительный, то увеличение значения фактора приводит к возрастанию параметра оптимизации.

**Пример.** Функция отклика — твердость после закалки (в единицах Бринелля), факторы — содержание углерода ( $X_1$ ), ванадия ( $X_2$ ), мас. %:

$$y = 250 + 350X_1 - 50X_2. \quad (4.12)$$

Наиболее сильное положительное влияние в формуле (4.12) оказывает первый фактор (содержание углерода), тогда как влияние ванадия противопо-



ложно. Таким образом, для увеличения твердости после закалки надо увеличивать содержание углерода и уменьшать содержание ванадия.

Коэффициенты при линейных факторах (линейные эффекты) — единственные коэффициенты модели, имеющие четкий физический смысл. Смысл коэффициентов при взаимодействующих и квадратичных эффектах бывает трудно определить достоверно.

Если было установлено, что линейная модель неадекватна, то переходят ко второму этапу. На нем производят усложнение модели с помощью нелинейных эффектов взаимодействия

$$y = b_0 + b_i X_i + b_{ij} X_i X_j. \quad (4.13)$$

Коэффициент  $b_{ij}$  в формуле (4.13) является *эффектом взаимодействия первого порядка*, или *коэффициентом парного взаимодействия*. Он показывает совместное влияние на параметр оптимизации первого и второго факторов. Взаимодействие факторов при достаточном их числе может быть тройным, четверным и т. д. Порядок эффекта взаимодействия на единицу меньше числа факторов в произведении. Для 3-х факторов такая модель будет следующей

$$y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_3 X_3 + b_{12} X_1 X_2 + b_{23} X_2 X_3 + b_{13} X_1 X_3 + b_{11} X_1 X_1 + b_{22} X_2 X_2 + b_{33} X_3 X_3. \quad (4.14)$$

Если модель (4.14) не дает необходимой адекватности, строят квадратичную модель (полную или неполную)

$$y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + b_{12} X_1 X_2 + b_{11} X_1 X_1 + b_{22} X_2 X_2. \quad (4.15)$$

Уравнение (4.15) описывает поверхность параболоида, и, возможно, его поверхность близка к области экстремума. В данном случае все определяется областью варьирования фак-

торов. В том случае если область мала, то адекватна будет линейная модель и для достижения экстремума необходимо поставить дополнительную серию опытов в целях определения своего местоположения на поверхности отклика — стоит ли двигаться дальше или экстремум уже достигнут.

## Построение таблицы условий проведения экспериментов

Построение таблицы условий проведения экспериментов осуществляется в несколько этапов.

На первом этапе осуществляется выбор центра проведения эксперимента. Все значения факторов отличаются от нулевого значения на величину  $\Delta x_i$ , которая называется интервалом варьирования.

На втором этапе производится процедура планирования для удобного кодирования факторов. Все факторы могут принимать три значения: нулевое (центр эксперимента), значение  $+1$ , соответствующее верхнему уровню, и значение  $-1$  — нижнему уровню. Кодированное значение будет

$$x_{\text{код}} = (x_i - x_0)/\Delta x_i, \quad (4.16)$$

где  $x_0$  — значение фактора на основном уровне.

После этого, на третьем этапе, производится построение таблицы проведения эксперимента. Задавая значения  $x_i = x_0 + \Delta x_i$  и  $x_i = x_0 - \Delta x_i$ , в формуле (4.16) получаем для верхнего и нижнего уровней  $\pm 1$ . Для двухфакторного эксперимента возможны четыре комбинации таких уровней — четыре опыта (табл. 4.1), величина 1 обычно опускается. На факторной плоскости — квадрат, в трехмерном факторном пространстве — куб,  $n$ -мерном пространстве — гиперкуб.

Таблица 4.1

Таблица проведения двухфакторного эксперимента типа  $2^2$

Номер опыта	Кодированное значение фактора $X_1$	Кодированное значение фактора $X_2$
1	+	+
2	—	+
3	+	—
4	—	—

## Полный факторный эксперимент (ПФЭ)

*Эксперимент*, в котором каждый фактор находится на верхнем или нижнем уровне, называется *двухуровневым*. Двухуровневый эксперимент для  $n$  факторов, содержащий  $2^n$  опытов, называется *полным факторным экспериментом* (эксперимент  $2^n$ ). Например, если число факторов 4, то следует поставить 16 опытов. В том случае, если число опытов эксперимента равно числу определяемых коэффициентов модели, такой эксперимент является насыщенным; если число опытов больше числа коэффициентов модели — ненасыщенным.

Матрица планирования полного факторного эксперимента содержит все возможные сочетания значений кодированных факторов и полученные отклики. Таблица, содержащая только кодированные значения факторов, называется *репликой*. Для реплики необходимо составить матрицу планирования в натуральном масштабе для проведения опытов и контроля. Кроме табличного, существует сокращенный метод записи реплик с помощью буквенных символов. Если первый фактор находится на верхнем уровне, ему присваивается буква  $a$ , второму фактору на верхнем уровне —  $b$ , и т. д., если на нижнем уровне — никак не обозначается, а если все факторы на нижнем уровне — единица. Для ПФЭ типа  $2^2$  краткая запись следующая:  $ab, a, b, 1$ .

Выпишем матрицу планирования ПФЭ (реплику)  $2^3$ . Для этого необходимо взять реплику ПФЭ  $2^2$  и дополнить ее значениями для третьего фактора на верхнем и нижнем уровнях. Это общее правило составления матриц ПФЭ более высокого порядка.

Еще одним способом составления реплик более высокого порядка является правило перемножения столбцов: приняв получающийся знак за новый вектор-столбец, допишем для нового фактора старую таблицу, поменяв знак на противоположный. Способ более трудоемкий, но эффективный.

Третий способ составления реплик: первый вектор-столбец — идет чередование факторов на верхнем и нижнем уровнях через 1, второй вектор-столбец — чередование через 2, далее чередование через 4 и т. д.

Для данной реплики можно написать матрицу планирования эксперимента в натуральном масштабе. Именно по такой матрице проводятся физические или расчетные опыты.

## Основные свойства матрицы планирования ПФЭ

Пусть имеется полный факторный эксперимент  $2^2$ , для которого модель имеет вид  $y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_{12}X_1X_2$ , где  $X_1, X_2$  — факторы в кодированных значениях, тогда справедливо следующее:

- 1) симметричность заключается в том, что сумма элементов любого столбца равна нулю  $\sum X_i = 0$ ;
- 2) нормировка — сумма квадратов элементов в любом столбце равна количеству опытов  $\sum X_i^2 = N$ ;
- 3) ортогональность — сумма произведений элементов двух любых столбцов равна нулю  $\sum X_i X_k = 0$ ;
- 4) ротатабельность — рассчитанные значения  $y$  имеют одинаковую точность на одном и том же расстоянии от центра эксперимента ( $X_0, X_1, \dots, X_n$ ) независимо от направления.

Иными словами, полученные уравнения предсказывают величину отклика с одинаковым среднеквадратичным отклонением. Данное свойство выполняется только для ортогональных моделей.

Проводимые опыты должны быть рандомизированы — для устранения влияния изменяющихся во времени факторов порядок выполнения опытов выбирается случайным образом по таблицам случайных чисел. Поскольку вычисленные коэффициенты  $b_i$  являются приближениями истинных коэффициентов  $\beta_i$ , для бесконечного числа опытов, постольку для линейной модели получаем несмешанную оценку определяемых факторов  $b_i - \beta_i$ . Попробуем определить для данной модели  $2^2$  коэффициенты для квадратичных членов: их вектор-столбцы оказались одинаковыми и совпадающими со столбцом для  $x_0$ , следовательно, величина  $b_0$  оказалась бы смешанной с вкладом квадратичных членов. Поэтому для определения коэффициентов при квадратичных членах пользуются иной матрицей планирования.

Истоки планирования экспериментов обнаруживаются в Китае за 2,2 тыс. лет до нашей эры. Там были найдены магические квадраты, в которых суммы по столбцам, строкам и диагоналям дают постоянное число, кроме того, каждое число в таком квадрате встречается только один раз. Позднее такие квадраты стали называть латинскими. В картинах Альбрехта Дюрера встречаются магические квадраты — аллегория «Меланхолия». В современной математике построение магических квадратов является задачей комбинаторного анализа. Лейбниц рассмотрел и решил основные комбинаторные задачи и указал на практическое применение комбинаторного анализа в статистике, кодировании и декодировании, комбинации наблюдений — наиболее близкой области к планированию эксперимента. В конце XIX в. математик Шредер применил латинские квадраты в алгебре логики при разработке теории алгоритмов — для минимизации числа перебора формул, входящих в вычис-

лительный алгоритм. Современное развитие математики планирования эксперимента связано с именем Рональда Фишера, который ввел понятия дисперсии, факторного анализа, заложил основы дисперсионного анализа, описал статистические свойства латинских квадратов.

### Таблица условий проведения эксперимента

Изучается влияние содержания углерода, ванадия и температуры закалки на прочность стали. Значение факторов на основном уровне составляет 0,20 %, 0,1 %, 950 °С соответственно. Устанавливают интервалы варьирования факторов: по содержанию углерода  $\pm 0,1$  %, ванадия  $\pm 0,05$  %, по температуре  $\pm 50$  °С. Составляется таблица для изменения факторов  $x_1, x_2, x_3$  в кодированных значениях (реплика), а также матрица проведения экспериментов в натуральном масштабе. Таким образом, будет определена вся область изменения варьируемых факторов.

### Определение коэффициентов модели в ПФЭ

Пусть имеется эксперимент  $2^2$ , для которого дана модель в кодированном масштабе

$$y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_{12}X_1X_2. \quad (4.16)$$

В таком случае для расчета коэффициентов модели (4.16) в полном факторном эксперименте (ПФЭ) воспользуемся методом наименьших квадратов (МНК).

Напишем функцию суммы квадратов разностей между экспериментальными значениями и функцией отклика, которую необходимо минимизировать, подобрав коэффициенты  $b_0 \dots b_{12}$ .

Приравняв частные производные по  $b_i$  к нулю, выписываем систему уравнений. Поскольку выполняются условия симметрии, нормировки и ортогональности, окончательно выражение для определения величины коэффициентов модели примет вид

$$b_i = (\sum x_i y_i) / N; \quad (4.17)$$

$$b_0 = (\sum y_i) / N; \quad (4.18)$$

$$b_{ij} = (\sum x_i x_j y_i) / N. \quad (4.19)$$

После расчета коэффициентов модели по формулам (4.17), (4.18) и (4.19) необходимо оценить точность их определения. Среднеквадратичное отклонение в определении коэффициентов  $b_i$  рассчитывают по формулам (4.20) и (4.21):

$$\Delta b_i = \sqrt{\frac{S_y^2}{N}} = \frac{S_y}{\sqrt{N}}; \quad (4.20)$$

$$S_y^2 = \frac{\sum (y_i - \bar{y})^2}{N - 1}. \quad (4.21)$$

Таким образом, чем меньше дисперсия воспроизводимости, тем меньше ошибка в определении коэффициентов модели.

Для того чтобы перейти от кодированного масштаба к натуральному, следует вместо кодовых значений факторов подставить соответствующие формулы кодирования из таблицы условий эксперимента.

Адекватность самой модели определяют с помощью критерия Фишера через отношение дисперсий неадекватности и изменения оптимизируемого параметра (дисперсия воспроизводимости) (отношение должно быть больше единицы). При этом надо учесть число степеней свободы: если для дисперсии неадекватности оно равно  $N - 1$ , то для дисперсии воспроизводимости  $N(n - 1)$ , где  $N$  — число опытов,  $n$  — число повторных наблюдений в опыте (параллель). Соотношение с табличным

значением критерия Фишера определяется из логики полученных величин дисперсий в числителе и знаменателе.

Рандомизированные во времени опыты, в которых уровни всех факторов одинаковы, называются *параллельными опытами*. При их проведении необходимо проверять однородность дисперсий для каждой параллели. Однородность дисперсий проверяется по критерию Кохрена (4.22) — отношению максимальной дисперсии к сумме всех дисперсий в параллелях

$$G_p = S_{\max} / \Sigma S_k. \quad (4.22)$$

Если  $G_p < G_{\alpha}$ , то принимается однородность дисперсий (выполняется равномерность), в противном случае следует дополнить критическую группу опытов (параллель) дополнительными экспериментальными точками или изменить масштаб параметра оптимизации, перейдя, например, к логарифмам оптимизируемой величины или ее квадратному корню.

## Дробный факторный эксперимент

Определяя коэффициенты из ПФЭ, можно заметить, что относительное количество определяемых коэффициентов для линейной модели существенно уменьшается с возрастанием числа опытов (3 коэффициента для  $2^2$ , 4 коэффициента для  $2^3$ ). Кроме того, для определения направления движения к области экстремума ограничиваются построением линейной модели, и проведение ПФЭ на начальных этапах при большом количестве факторов нецелесообразно.

В 1945 г. Д. Финни ввел дробные реплики, использованные в 1954–56 гг. Дж. Боксом для решения технологических задач в области кинетики химических реакций. Суть дробного факторного эксперимента (ДФЭ) состоит в том, чтобы сде-



лать насыщенным план проведения эксперимента, существенно уменьшив тем самым количество опытов.

Заменим в реплике ПФЭ  $2^2$  столбец парных взаимодействий на столбец  $X_3$ , тем самым введя новый варьируемый фактор. При подобной замене запись вида  $X_3 = X_1 \cdot X_2$  называется генерирующим соотношением, которое показывает, с каким из эффектов связан данный ( $X_3$ ) эффект. Реплика ПФЭ  $2^2$  преобразуется в реплику ДФЭ типа  $2^{3-1}$  или полуреплику  $2^3$ .

От генерирующего соотношения перейдем к понятию определяющего контраста ДФЭ. Для этого умножим левую и правую части генерирующего соотношения на величину линейного эффекта, заменяющего парное взаимодействие,

$$X_3 = X_1 X_2 \rightarrow X_3 X_3 = X_1 X_2 X_3 \rightarrow 1 = X_1 X_2 X_3. \quad (4.23)$$

Выражение (4.23) представляет собой определяющий контраст ДФЭ, с помощью которого можно определить систему смешивания эффектов. Для этого нужно умножить обе части определяющего контраста на столбец, соответствующий данному эффекту. Из равенства вектор-столбцов можно найти смешение оценок определения коэффициентов уравнения

$$\text{для } X_1: X_1 = X_1 X_1 X_2 X_3 \rightarrow X_1 = X_2 X_3; \quad (4.24)$$

$$X_2: X_2 = X_2 X_1 X_2 X_3 \rightarrow X_2 = X_1 X_3; \quad (4.25)$$

$$X_3: X_3 = X_3 X_1 X_2 X_3 \rightarrow X_3 = X_2 X_1. \quad (4.26)$$

Из уравнений (4.24)–(4.26) следует, что каждый из коэффициентов при линейных (основных) эффектах будет смешан с эффектами парных взаимодействий, дополняющих линейные, и коэффициенты при линейных факторах будут выражены при помощи оценок (4.27)–(4.30)

$$b_1: \beta_1 + \beta_{23}; \quad (4.27)$$

$$b_2: \beta_2 + \beta_{13}; \quad (4.28)$$

$$b_3; \beta_3 + \beta_{12}; \quad (4.29)$$

$$b_0; \beta_0. \quad (4.30)$$

При минимизации числа опытов стремятся выбрать реплику, в которой основные эффекты смешаны с эффектами взаимодействия возможно большего порядка. Это связано с тем, что в большинстве случаев основные эффекты сильнее парных, а те сильнее тройных и т. д. В приведенном примере именно основные эффекты связаны с парными, а не между собой. Число уравнений в системе смешивания равно числу опытов.

Выбор той или иной полуреплики зависит от конкретной постановки задачи и априорных сведений.

Планы ДФЭ иногда различают по разрешающей способности, т. е. наибольшему числу факторов в определяющем контрасте реплики: разрешающая способность будет тем больше, чем выше порядок взаимодействий, с которыми смешиваются линейные эффекты. В зависимости от числа получаемых коэффициентов и требуемых эффектов взаимодействия выбирают дробные реплики, чаще путем перебора, т. к. к настоящему времени нет законченной теории ДФЭ. Тем не менее можно предложить общие правила:

- 1) число определяемых коэффициентов не превышает число опытов;
- 2) для построения реплики ДФЭ  $2^{k-p}$  берется реплика для ПФЭ, в которой эффекты парных взаимодействий заменяются недостающими факторами и их взаимодействиями.

Обычно требуется оценить с возможно большим разрешением линейные эффекты  $k$  факторов и  $m$  их взаимодействий для ДФЭ  $2^{k-p}$ . Для этого необходимо, чтобы число элементов  $X_1, \dots, X_{k+m}$  для возможных произведений не было равно  $2^{k-p} - 2$  или  $2^{k-p} - 3$ . Это условие является необходимым, но недостаточным.

## Оптимизация объектов исследования поисковыми методами

Во многих случаях перед исследователем ставится задача не только выявить характер связей между входными и выходными переменными того или иного объекта, но также (на завершающей стадии исследования) найти оптимальное сочетание входов (факторов), при котором определенный выход, или отклик объекта (параметр оптимизации), или определенная функция нескольких выходов (целевая функция)  $Y$  достигают своего экстремального значения (минимума или максимума),

$$y = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_k) = f(X) \rightarrow \min (\max),$$

где  $X$  — вектор входов.

Графическая интерпретация задачи оптимизации объекта

$$y = f(x_1, x_2) \rightarrow \max$$

при двух входах (факторах)  $x_1, x_2$  представлена на рис. 4.2. Здесь точки  $A$  и  $y_n = f(A)$  характеризуют начальное состояние объекта, замкнутые кривые в горизонтальной плоскости — контуры одинакового уровня  $y$ .  $E$  — точка оптимального сочетания факторов (соответствующая максимальному значению  $y_{\max} = 100\%$ ). Траектория шагов движения к оптимуму в факторном пространстве обозначена стрелками.

Существует множество методов оптимизации: простейшие и такие, которые требуют от исследователя определенной подготовки. Разумеется, в рамках настоящей книги представляется возможным рассмотреть лишь некоторые из них, причем подборка методов осуществлена с учетом практической применимости к задачам оптимизации в области металлургии и литейного производства. В одних методах в процессе оптимизации используется математическая модель объекта, а в других случаях этого не требуется.

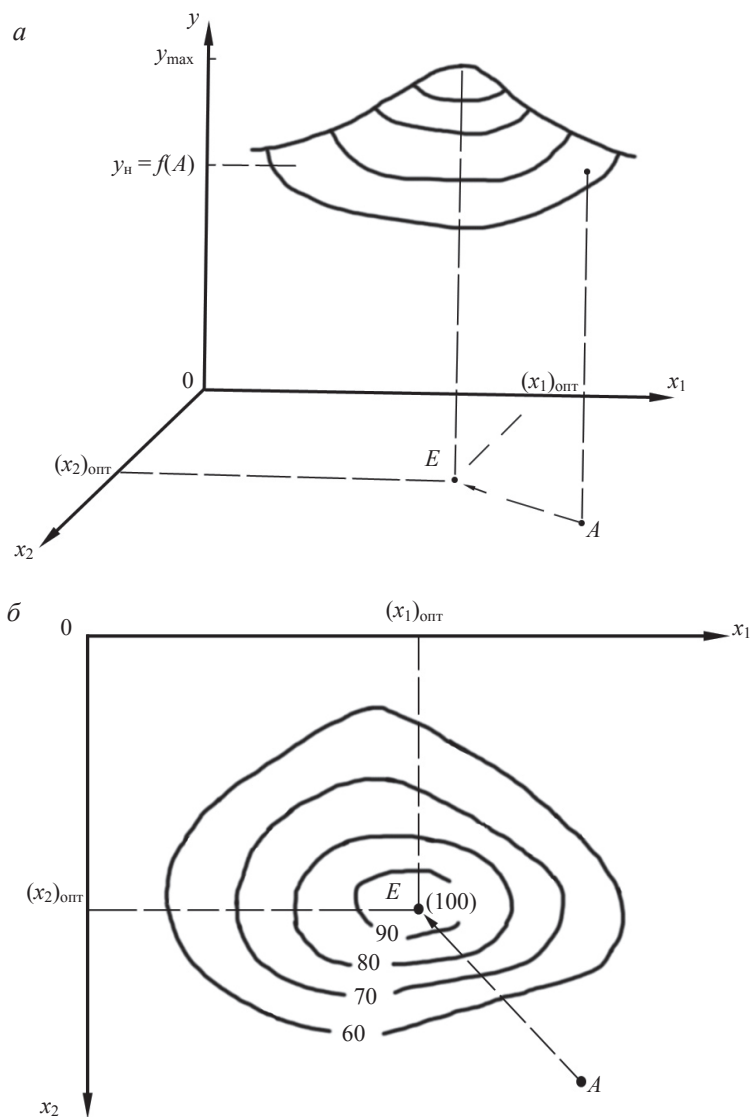


Рис. 4.2. Геометрическое представление задачи оптимизации:  
*a* — в трехмерной системе координат; *б* — в двухмерной системе координат

В металлургии и литейном производстве объекты, как правило, отличаются повышенной сложностью, а связи между входами и выходами часто носят вероятностный характер. В этих условиях построение аналитических моделей объектов невозможно и широко используются статистические модели, находимые рассмотренными выше методами. Поэтому аналитические методы оптимизации (методы математического программирования) имеют ограниченное применение. Гораздо более широкое распространение получили поисковые методы оптимизации.

Общим для всех поисковых методов является то, что в процессе их осуществления производят шаговое изменение входов объекта (факторов) и, наблюдая за объектом, отмечают реакцию (отклик) параметра оптимизации или целевой функции на это изменение. Если состояние объекта меняется в нужном направлении (например, параметр оптимизации или целевая функция увеличивается в задачах поиска их максимума), то повторяют такое же воздействие со стороны входов объекта. Если же обнаруживают, что в ответ на произведенное входное воздействие реакция объекта не соответствует желаемой, направление следующего шага входного воздействия изменяют на противоположное.

Известный из производственной практики метод проб и ошибок, в котором факторы изменяют на основании опыта, интуиции или наугад, при обычно имеющем место значительном числе факторов оказывается малоэффективным.

Требуют меньшего числа шагов изменения факторов (проб) и быстрее ведут к цели те поисковые методы, в которых шаговое варьирование факторами производится по определенному плану.

## Оптимизация многофакторных объектов

Исследуемые объекты металлургического и литейного производств, как правило, характеризуются наличием большого числа факторов. Здесь особое значение приобретает стратегия оптимизирующего эксперимента, позволяющая минимизировать число требуемых опытов.

### Метод Гаусса — Зейделя

В этом методе поиск оптимального состояния объекта осуществляют поочередным варьированием каждого фактора (при постоянстве остальных) до достижения частного экстремума параметра оптимизации (или целевой функции). Процесс поиска оптимума методом Гаусса — Зейделя в графическом виде представлен на рис. 4.3.

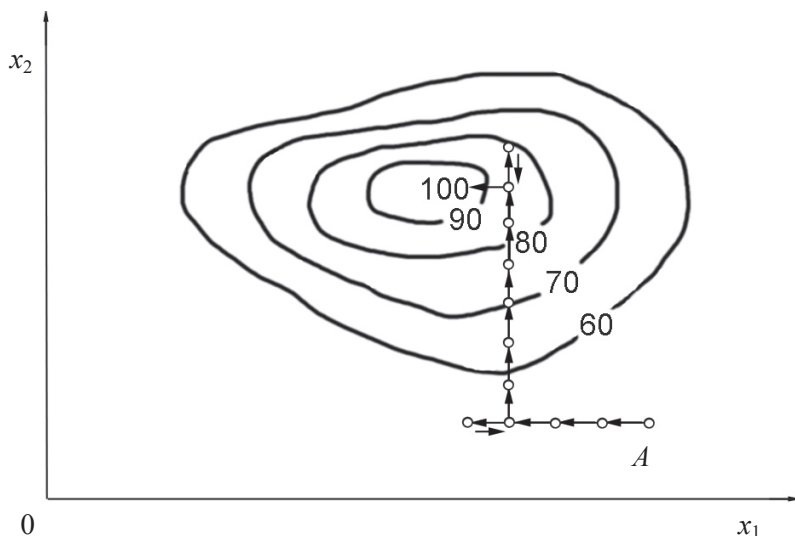


Рис. 4.3. Процесс оптимизации методом Гаусса — Зейделя

Метод Гаусса — Зейделя достаточно прост, но при большом числе факторов не позволяет быстро достичь области оптимума.

### Методы случайного поиска

Существует множество методов случайного поиска оптимальных решений, в каждом из которых используется математический аппарат теории вероятностей. В одном из часто реализуемых методов координата начальной точки и компоненты вектора начального направления поиска определяются случайным выбором (с помощью случайных чисел). В отличие от метода Гаусса — Зейделя, отрезки траектории случайного поиска в общем случае не параллельны ни одной из координатных осей, т. е. все факторы в каждом шаге изменяются одновременно (рис. 4.4). Это ускоряет достижение области оптимума и тем самым сокращает количество шагов. В выбранном направлении движутся в факторном пространстве до тех пор, пока очередной шаг не ухудшит состояния объекта.

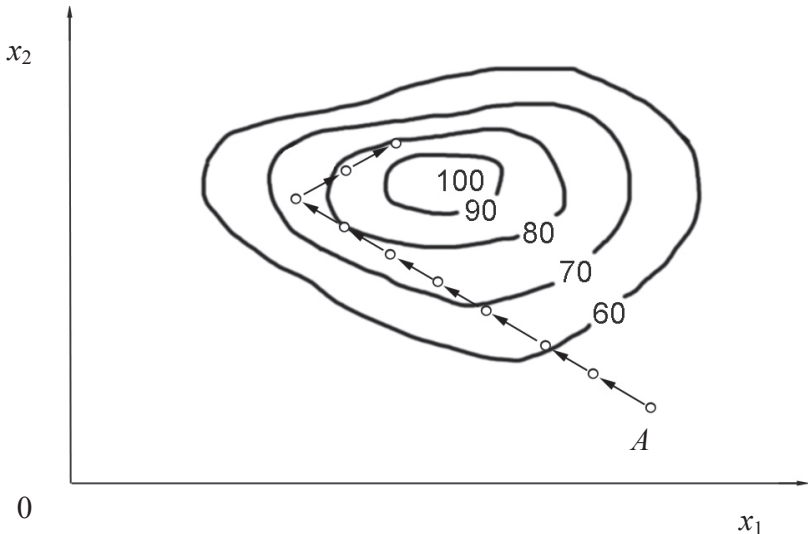


Рис. 4.4. Процесс оптимизации методом случайного поиска

Под *движение в факторном пространстве* здесь и далее подразумевается выбор сочетания факторов следующего опыта. После этого также случайным выбором определяется дальнейшее направление поиска и так до выхода в окрестности оптимума.

В адаптивном алгоритме случайного поиска с переменным шагом размер шага, первоначально равный единице, в дальнейшем изменяют в зависимости от достигаемого улучшения выхода объекта. Если два последовательных шага улучшают значение выхода, шаг увеличивают в  $\alpha_1$  раз. Если же  $m$  последовательных шагов не дают улучшения, то шаг уменьшают в  $\alpha_2$  раз. При этом могут быть учтены ограничения, наложенные на пространство факторов. Так с достижением границы области допустимых значений факторов производят внеочередной случайный выбор допустимого направления дальнейшего поиска.

Рекомендуется принимать  $\alpha_1 = 1,618$ ;  $\alpha_2 = 0,618$  и  $m = 3k$ , где  $k$  — число факторов.

### Метод градиента

Напомним, что градиент представляет собой вектор, построенный из данной точки факторного пространства,

$$x_1; x_2; x_3 \dots x_k.$$

В направлении наиболее крутого возрастания  $y$  градиент определяется по выражению (4.31)

$$\text{grad}(y) = \frac{\partial y}{\partial x_1} \vec{i} + \frac{\partial y}{\partial x_2} \vec{j} + \dots + \frac{\partial y}{\partial x_k} \vec{k}, \quad (4.31)$$

где  $\vec{i}$ ,  $\vec{j}$ , ...,  $\vec{k}$  — единичные векторы в направлении координатных осей. Если математическая модель объекта имеет вид (4.32)

$$y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \dots + b_k X_k, \quad (4.32)$$

то

$$\text{grad}(y) = b_1 \vec{i} + b_2 \vec{j} + \dots + b_k \vec{k}. \quad (4.33)$$



На рис. 4.5 показана траектория движения к оптимуму по методу градиента. Стрелки, обозначающие направление траектории, по существу являются проекциями градиента на плоскость  $x_1Ox_2$ . Отсюда следует, что эти стрелки всегда располагаются по нормали к контурам одинакового уровня  $y$ .

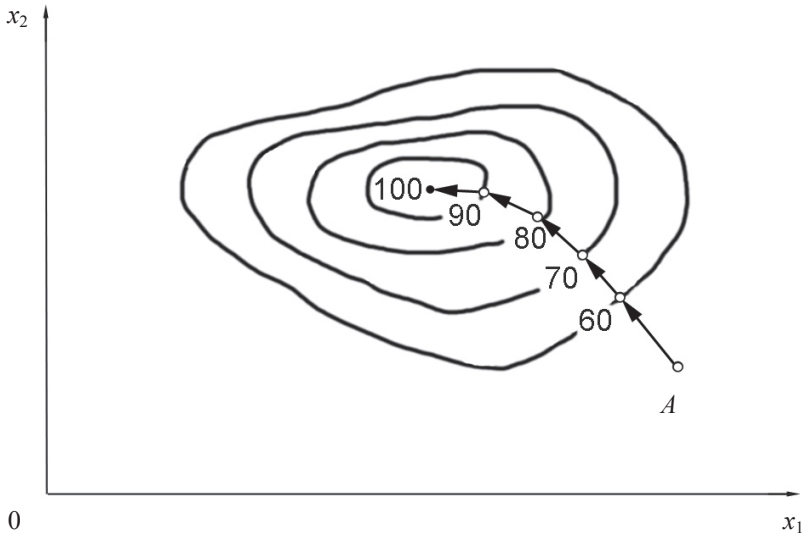


Рис. 4.5. Процесс оптимизации методом Градиента

Отрицательная черта метода градиента с точки зрения его практической реализации проявляется в том, что он требует уточнять направление градиента по формуле (4.33) после каждого шага поиска. Для этого перед началом каждого последующего шага требуется или ставить полный (либо дробный) факторный эксперимент, или осуществлять пробные движения вдоль координатных осей для определения нового значения градиента.

### Метод крутого восхождения (Бокса — Уилсона)

Метод крутого восхождения по поверхности отклика является высокоэффективным методом поиска оптимума. Для своей реализации он требует небольшого количества опытов.

Сущность метода крутого восхождения по поверхности отклика рассмотрим на примере двухфакторной задачи (рис. 4.6).

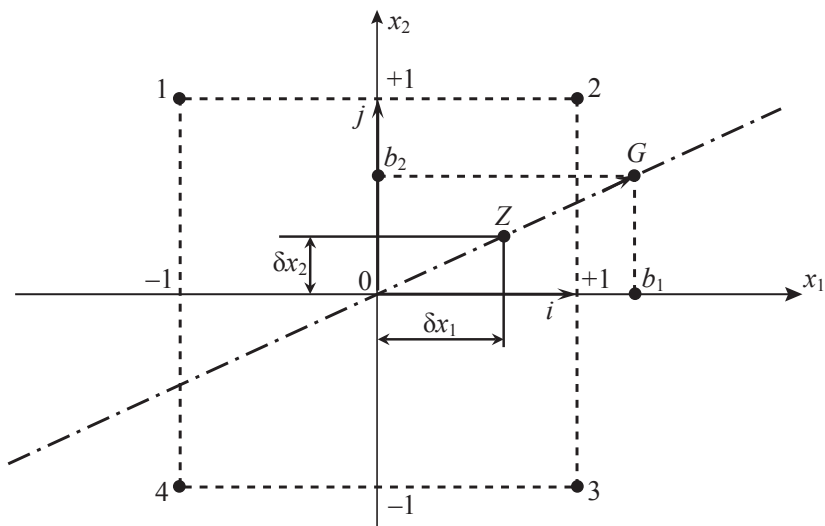


Рис. 4.6. Определение градиента по результатам ПФЭ

Пусть в окрестностях точки  $O$  как центра плана поставлен ПФЭ типа  $2^2$ . Координаты отдельных опытов соответствуют точкам 1...4. По результатам ПФЭ можно рассчитать коэффициенты математической модели  $b_0, b_1, \dots, b_k$  исследуемого объекта.

Пусть эта модель имеет вид

$$y = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2. \quad (4.34)$$

На основании формулы (4.34) определим градиент

$$\text{grad}(y) = b_1 \vec{i} + b_2 \vec{j}. \quad (4.35)$$

Отложив согласно формуле (4.35) составляющие градиента  $b_1 \vec{i}$  и  $b_2 \vec{j}$  на координатных осях  $X_1$  и  $X_2$ , определяем градиент как вектор  $OG$ . В направлении градиента осуществляют поиск ближайшего локального максимума.

Для того чтобы из центра плана переместиться в произвольную точку  $Z$  факторного пространства, лежащую на линии градиента, необходимо изменить факторы на  $\delta X_1$ ,  $\delta X_2$ , причем

$$\delta X_1 / \delta X_2 = b_1 / b_2. \quad (4.36)$$

Однако  $\delta X_1 = h_1 / \Delta x_1$ ;  $\delta X_2 = h_2 / \Delta x_2$ , где  $h_1$ ,  $h_2$  — шаги изменения факторов в натуральном измерении;  $\Delta x_1$ ,  $\Delta x_2$  — интервалы варьирования факторов при постановке ПФЭ.

Отсюда следует, что шаги изменения факторов  $h_1$  и  $h_2$  при условии постановки опыта на линии градиента должны соотноситься между собой следующим образом:

$$h_1 / h_2 = b_1 \Delta x_1 / b_2 \Delta x_2. \quad (4.37)$$

Соотношение (4.37) распространяется на любое число факторов в задачах более высокой размерности.

При поиске максимума, после определения градиента в начальной точке  $A$  (рис. 4.7) путем постановки, например, ПФЭ типа  $2^2$ , отдельные опыты которого обозначены цифрами 1...4, в направлении градиента  $AB$  намечают ряд шагов (опытов) 5...7 и т.д. В процессе поиска движутся в этом направлении до тех пор, пока не будет обнаружен локальный максимум (точка  $L$  на рисунке). В точке последнего находят новое направление градиента ( $LC$ ). Дальнейший поиск ведут в этом направлении и т.д. до выхода в окрестности глобального экстремума (оптимума).

Если ставится задача поиска не максимума, а минимума поверхности отклика, то процедура поиска отличается от рассмотренной ранее лишь тем, что движение в факторном пространстве направлено не по градиенту, а по антиградиенту (т.е.

в противоположную сторону). Такая модификация метода крутого восхождения известна под названием процедуры наискорейшего спуска.

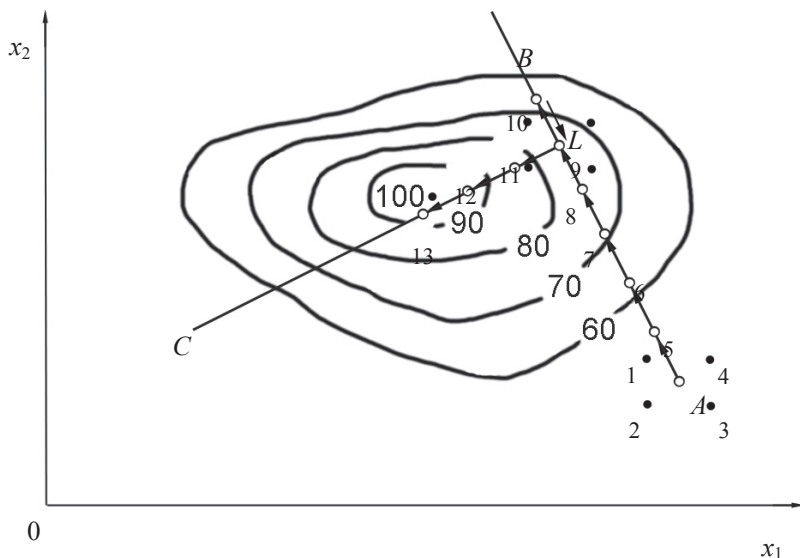


Рис. 4.7. Процесс оптимизации методом крутого восхождения

Практически алгоритм процесса оптимизации методом крутого восхождения сводится к следующей последовательности операций:

- 1) планирование и постановка ПФЭ (или ДФЭ) в окрестностях точки начального состояния;
- 2) расчет коэффициентов  $b_i$  линейной математической модели объекта (4.34) для определения направления градиента;
- 3) расчет произведений  $b_i \Delta x_i$ , где  $\Delta x_i$  — интервалы варьирования факторов при ПФЭ (ДФЭ);
- 4) выбор базового фактора  $x_i = x_{a_s}$  у которого

$$|b_i \cdot \Delta x_i| = a = \max;$$

- 5) выбор шага крутого восхождения для базового фактора  $h_a$ . Этот выбор производят на основании имеющейся априорной информации или с учетом опыта исследователя, технологических соображений, удобства отсчета и проч.;
- 6) расчет шагов изменения других факторов по формуле

$$h_i = (b_i \cdot \Delta x_i) h_a / a. \quad (4.38)$$

Коэффициенты  $b$  в выражении (4.38) берутся со своими знаками, а шаги  $h_i$  можно округлять. Важно подчеркнуть, что указанное здесь соотношение между величинами шагов изменения отдельных факторов является условием движения по градиенту в данном факторном пространстве;

- 7) составление плана движения по градиенту. Для этого в соответствии с определенными значениями шагов изменения факторов и их последовательным алгебраическим суммированием с основным уровнем, в точке  $A$  находят координаты опытов 5...7 и т. д. (см. рис. 4.7). Часть этих опытов полагают мысленными. Перевод координат в кодированную форму и подстановка их в уравнение модели объекта должны показать действительное возрастание  $y$  (проверка расчетов). Другие опыты реализуют на практике, определяя последовательность значений  $y$  в направлении градиента. Из опытных данных находят положение локального экстремума ( $L$ );
- 8) в окрестностях локального экстремума ставят новую серию опытов (ПФЭ или ДФЭ) для определения нового направления градиента ( $LC$  на рис. 4.7);
- 9) переходят к движению по новому направлению градиента в соответствии с изложенными выше правилами до достижения следующего локального экстремума и т. д., вплоть до выхода в окрестности искомого глобального оптимума состояния объекта.

О высокой эффективности метода крутого восхождения говорит тот факт, что локальный экстремум был найден постановкой всего лишь 13 опытов (из них 8 для определения начальной математической модели). Для проведения статистического анализа число опытов может быть увеличено.

Как следует из полученных данных, уже в точке локального экстремума прочность сплава повысилась более чем в 2,5 раза по сравнению с первоначальной.

В качестве рекомендаций к использованию метода крутого восхождения отметим, что при выборе шагов варьирования факторов совершение шага в процессе поиска оптимума не должно выводить объем за границы допустимой области значений факторов. Если через некоторое число шагов эта граница оказалась достигнутой одним из факторов, то при дальнейшем поиске такой фактор должен быть зафиксирован и число варьируемых факторов сократится.

В задачах поиска экстремума-минимума знаки коэффициентов  $b_i$  нужно поменять на обратные (для определения движения по антиградиенту в факторном пространстве).

По мере приближения к общему (глобальному) экстремуму, степень кривизны поверхности отклика возрастает и линейные модели становятся неадекватными, что снижает вероятность успеха поиска оптимума методов крутого восхождения. Здесь требуется уменьшать степень дробности ДФЭ, от ДФЭ переходить к ПФЭ, а если и этого окажется недостаточно, перейти от планов эксперимента первого порядка к планам второго порядка.

В условиях многофакторности объектов металлургического и литейного производства и часто наблюдающегося дрейфа их характеристик, любое увеличение количества опытов (а их достаточно много в планах второго порядка) приводит к тому, что достижение полного успеха в задачах оптимизации становится маловероятным. Большую помощь исследователю здесь оказывает симплексный метод оптимизации, в котором построение математической модели объекта вообще не требуется.

## Особенности оптимизации объектов при наличии нескольких экстремумов

Ранее рассматривались случаи, когда поверхность отклика  $y = f(X)$  характеризовалась наличием одного экстремума. Такое свойство поверхности отклика называется *унимодальностью*. Известны и более сложные случаи, когда поверхность отклика *мультимодальная*, т. е. имеет несколько экстремумов. Для осуществления поиска их и сравнения величин выхода объекта в целях определения главного (глобального) экстремума, поиск необходимо осуществлять из различных точек начального состояния.

Если результаты поиска сходятся, т. е. приводят к одному и тому же экстремуму поверхности отклика, то может быть сделан вывод о том, что данные точки начального состояния попадают в «зону притяжения» найденного экстремума. В том же случае, когда результаты поиска расходятся к разным экстремумам, исследователь имеет основание распознать многоэкстремальную задачу. Исследователь должен иметь в виду, что в ряде случаев поверхность отклика может иметь сложную форму при наличии «оврагов», «хребтов», «седловин». Последние характеризуются тем, что точка минимума по одному направлению в факторном пространстве является точкой максимума по другому направлению.

Последовательная постановка проб в различных точках факторного пространства является надежным способом проверки поверхности отклика на унимодальность или многоэкстремальность. При обнаружении многоэкстремальности следует исследовать «зоны притяжения» всех экстремумов, определить численные значения каждого из них для соответствующей комбинации факторов и по результатам сравнения выбрать глобальный экстремум.

## Общие представления о планах второго порядка

В данной главе рассматриваются планы экспериментов для построения модели второго порядка, имеющей вид

$$\eta = \beta_0 + \sum_{1 \leq i \leq k} \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i \leq j \leq k} \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leq i \leq k} \beta_{ii} x_i^2, \quad (4.39)$$

где  $\eta$  — истинная величина отклика;  $\beta_i, \beta_{ij}, \beta_{ii}$  — истинные значения коэффициентов;  $k$  — число факторов.

Число членов модели (4.39) определяется по формуле

$$C_{k+2}^k = \frac{(k+2)!}{k! \cdot 2!} = \frac{(k+1)(k+2)}{2},$$

поэтому число опытов  $N$  для ее построения должно быть не меньше

$$N \geq \frac{(k+1)(k+2)}{2}. \quad (4.40)$$

Кроме того, необходимо, чтобы каждый фактор варьировался не менее чем на трех уровнях.

Опыты могут проводиться в одной из двух областей: на  $k$ -мерном гиперкубе  $|x_i| \leq 1$  или на  $k$ -мерном гипершаре  $\sum_{i=1}^k x_i^2 \leq 1$ .

По результатам опытов рассчитывают выборочные оценки коэффициентов модели (4.39) и строят уравнение регрессии

$$y = b_0 + \sum_{1 \leq i \leq k} b_i x_i + \sum_{1 \leq i \leq j \leq k} b_{ij} x_i x_j + \sum_{1 \leq i \leq k} b_{ii} x_i^2. \quad (4.41)$$

Расчет коэффициентов уравнения (4.41) обычно проводят методом наименьших квадратов.

В дальнейшем будут рассматриваться симметричные композиционные планы. Под *композиционностью* понимают последовательную достройку линейных планов до планов второго



порядка. Эта процедура предполагает реализацию опытов полного или дробного факторного эксперимента, а затем добавление к этим опытам («ядру» плана) некоторого количества специальным образом расположенных так называемых звездных точек. Такие *планы* обычно называют *центральными*, поскольку все опыты располагаются симметрично вокруг центра — основного уровня. В качестве примера один из центральных композиционных планов для  $k = 2$  показан в табл. 4.2.

Таблица 4.2

Центральный композиционный план для  $k = 2$ 

Системы опытов	Номер опыта	$x_1$	$x_2$
Ядро плана ПФЭ	1	+1	+1
	2	−1	+1
	3	+1	−1
	4	−1	−1
Опыты в звездных точках	5	+ $\alpha$	0
	6	− $\alpha$	0
	7	0	+ $\alpha$
	8	0	− $\alpha$
Опыт в центре плана	9	0	0

Общее число опытов  $N$  композиционных планов при  $k$  факторах

$$N = N_1 + 2n + n_0, \quad (4.42)$$

где  $N_1$  — число опытов в ядре плана ( $N_1 = 2^k$ , если ядром плана является ПФЭ и  $N_1 = 2^{k-p}$ , если ядром плана является ДФЭ);  $2n$  — число звездных точек;  $n_0$  — число опытов в центре плана. При этом выполняется условие (4.40).

Решение задачи по построению модели осуществляется в несколько этапов. Например, в случае двух факторов вначале ставят опыты 1...4 (табл. 4.3), составляющие ядро плана и позволяющие построить либо линейную

$$y = b_0 + \sum_{1 \leq i \leq k} b_i x_i,$$

либо неполную квадратичную модель

$$y = b_0 + \sum_{1 \leq i \leq k} b_i x_i + \sum_{1 \leq i \leq j \leq k} b_{ij} x_i x_j.$$

Если эти модели окажутся неадекватными, добавляют опыты в звездных точках 5...8 и в центре эксперимента 9, что позволяет построить уже квадратичную модель (4.41).

Свойства симметричных композиционных планов заметно зависят от величины звездного плеча  $\alpha$  и числа опытов в центре плана  $n_0$ .

### Симметричные композиционные ортогональные планы

Ортогональность упрощает вычислительные формулы и, что самое главное, дает возможность оценивать коэффициенты независимо друг от друга. В общем случае симметричные композиционные планы не ортогональны. Добиться ортогональности можно с помощью следующего приема. Сначала необходимо преобразовать модель (4.41)

$$y = (b_0 + \lambda_2 \sum_{i=1}^k b_{ii}) + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i < j}^k b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^k b_{ii} (x_i^2 - \lambda_2), \quad (4.43)$$

где  $\lambda_2$  является средним квадратом значений любого фактора,

$$\lambda_2 = N^{-1} \sum_{u=1}^k x_{iu}^2.$$

Обозначим новые переменные

$$x_i^2 - \lambda_2 = x'_i, \quad (4.44)$$

а новый свободный член

$$b_0 + \lambda_2 \sum_{i=1}^k b_{ii} = b'_0. \quad (4.45)$$

В таком случае с учетом выражений (4.44)–(4.45) модель (4.43) примет вид

$$y = b'_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i < j} b_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^k b_{ii} x_i' \quad (4.46)$$

Величина звездного плеча также выбирается из условий ортогональности

$$\alpha^2 = \frac{\sqrt{(N_1 + 2k + n_0)N_1} - N_1}{2}, \quad (4.47)$$

т. е. величина  $\alpha$  будет меняться в зависимости от числа опытов в ядре ( $N_1$ ) и в центре плана ( $n_0$ ), а также будет разной для задач с различным числом факторов  $k$ .

В табл. 4.3 приведены различные значения  $\alpha^2$ , подсчитанные для планов с разными  $k$  и  $n_0$ , во всех случаях, кроме  $k = 5$ ,  $N_1 = 2^k$ .

Таблица 4.3

Значения  $\alpha^2$  в зависимости от  $k$  и  $n_0$

$n_0$	$k$			
	2	3	4	5 ( $2^{5-1}$ с $1 \equiv x_1 x_2 x_3 x_4 x_5$ )
1	1,000	1,477	2,000	2,392
2	1,160	1,650	2,164	2,580
3	1,317	1,831	2,390	2,770
4	1,475	2,000	2,580	2,950
5	1,606	2,164	2,770	3,140
6	1,742	2,325	2,950	3,310
7	1,873	2,481	3,140	3,490
8	2,000	2,633	3,310	3,660

### Порядок постановки опытов

Для оценки точности эксперимента, в каждой  $u$ -й точке факторного пространства проводят  $m$  опытов. Это так называемые параллельные опыты. В результате получают значения  $y_{u1}, y_{u2}, \dots, y_{um}$  исследуемого параметра, для которых находят среднее значение

$$\bar{y}_u = m^{-1} \sum_{t=1}^m y_{ut}, \quad (4.48)$$

где  $m$  — число параллельных опытов;  $y_{ut}$  — исследуемый параметр;  $t$  — номер параллельного опыта,  $t = 1, 2, \dots, m$ .

Чтобы исключить влияние систематических ошибок на формулу (4.48), вызванных влиянием внешней среды и неконтролируемых факторов, рекомендуется случайная последовательность при постановке опытов, которая называется *рандомизацией*. Рандомизацию опытов можно провести с помощью генератора случайных чисел или таблицы случайных чисел, а также с помощью компьютера.

### Проверка воспроизводимости опытов (однородности дисперсий)

*Опыт* считается *статически воспроизводимым*, если дисперсия выходного параметра  $\sigma_y$  однородная (одинаковая) в каждой точке факторного пространства. Оценка дисперсии для каждой  $u$ -й точки факторного пространства определяется по формуле (4.49)

$$S_{y_u}^2 = (m-1)^{-1} \sum_{t=1}^m (y_{ut} - \bar{y}_u)^2, \quad (4.49)$$

где  $\bar{y}_u$  — среднее значение параметра  $y$  в  $u$ -строке;  $m$  — число параллельных опытов;  $y_{ut}$  — значение выходного параметра  $y$  в  $u$ -строке.

Гипотезу о воспроизводимости опытов (об однородности дисперсий) проверяют с помощью критерия Кохрена. Расчетное значение критерия Кохрена вычисляют по формуле (4.50)

$$G_p = \frac{\max S_{y_u}^2}{\sum_{u=1}^N S_{y_u}^2}, \quad (4.50)$$

где  $N$  — число опытов.

Критическое значение критерия Кохрена  $G_{кр}$  находят из таблицы распределения Кохрена по числу степеней свободы числителя  $f_1 = m - 1$  и знаменателя  $f_2 = N$  и уровню значимости  $\alpha$ .

Если  $G_p < G_{кр}$ , гипотеза об однородности дисперсий принимается, в противном случае отвергается, и тогда эксперимент нужно повторить, изменив условия его проведения (набор факторов, интервал их варьирования, точность измерительных приборов и др.).

Коэффициенты модели в ортогональном плане определяют по формулам (4.51)

$$\begin{aligned} b'_0 &= \frac{\sum_{u=1}^N y_u}{N}; \\ b_i &= \frac{\sum_{u=1}^N x_{iu} y_u}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2}; \\ b_{ij} &= \frac{\sum_{u=1}^N (x_i x_j)_u y_u}{\sum_{u=1}^N (x_i x_j)_u^2}; \\ b_{ii} &= \frac{\sum_{u=1}^N x'_{iu} y_u}{\sum_{u=1}^N x'^2_{iu}}. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Дисперсии оценок коэффициентов определяют по формулам (4.52)

$$\begin{aligned} S_{b'_0}^2 &= \frac{S_y^2}{N}; \\ S_{b_i}^2 &= \frac{S_y^2}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2}; \\ S_{b_{ij}}^2 &= \frac{S_y^2}{\sum_{u=1}^N (x_i x_j)_u^2}; \\ S_{b_{ii}}^2 &= \frac{S_y^2}{\sum_{u=1}^N x_{iu}'^2}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

После расчета коэффициентов и проверки (при необходимости) их статистической значимости переходят от модели (4.46) к модели в обычной форме (4.41), рассчитав по формуле (4.53) значение  $b_0$

$$b_0 = b'_0 - \lambda_2 \sum_{i=1}^k b_{ii}. \quad (4.53)$$

Поскольку коэффициенты  $b'_0$  и  $b_{ii}$  оценены независимо друг от друга, дисперсия  $S_{b_0}^2$  определяется по формуле (4.54) по закону накопления ошибок

$$S_{b_0}^2 = S_{b'_0}^2 + \lambda_2^2 \sum_{i=1}^k S_{b_{ii}}^2. \quad (4.54)$$

Проверка значимости коэффициентов уравнения регрессии проводится по критерию Стьюдента. Гипотеза о значимости коэффициентов регрессии принимается, если выполняются следующие неравенства:

$$\begin{aligned}
 |b_i| &> t_{\text{кр}} S_{i\cdot}, \\
 |b_{ii}| &> t_{\text{кр}} S_{ii}, \\
 |b_{ij}| &> t_{\text{кр}} S_{ij}, \\
 |b_0| &> t_{\text{кр}} S_{b0}.
 \end{aligned}
 \tag{4.55}$$

Критическое значение критерия Стьюдента  $t_{\text{кр}}$  находят из таблицы распределения Стьюдента по числу степеней свободы и уровню значимости  $\alpha$ . Число степеней свободы  $f = m - 1$ .

Если неравенства (4.55) не выполняются, коэффициент регрессии считается незначимым и приравнивается нулю. Поскольку все коэффициенты оцениваются независимо, изменение оценки любого коэффициента (например, исключение соответствующего коэффициента из уравнения) не приводит к изменению других оценок и их дисперсий. Исключение составляет коэффициент  $b_0$ , т. к. он связан с оценками при квадратичных членах, поэтому их исключение приводит к изменению  $b_0$ .

### Проверка адекватности полученной математической модели

Проверка адекватности полученного уравнения регрессии экспериментальным данным проводится с помощью критерия Фишера, расчетное значение которого представляет собой отношение (4.56)

$$F_p = S_{\text{неад}}^2 / S_y^2, \tag{4.56}$$

где  $S_{\text{неад}}^2$  — оценка дисперсии неадекватности;  $S_y^2$  — оценка дисперсии воспроизводимости эксперимента.

Оценка дисперсии неадекватности определяется по формуле (4.57)

$$S_{\text{неад}}^2 = \frac{1}{N - B} \sum (\bar{y}_u - y_{up})^2, \tag{4.57}$$

где  $B$  — число значимых коэффициентов уравнения регрессии;  $y_u$  — экспериментальное значение функции отклика;  $y_{\text{ир}}$  — расчетное значение функции отклика.

Критическое значение критерия Фишера  $F_T$  находится из таблицы распределения Фишера по числу степеней для числителя  $f_1 = N - B$ , знаменателя  $f_2 = m - 1$  и уровню значимости  $\alpha$ . Если отношение  $F_T/F_p$  больше 20, то гипотеза об адекватности математической модели принимается.

### Пример расчета симметричного композиционного ортогонального плана

Изучается зависимость относительного удлинения  $\delta$ , %, в сплавах системы Re — Rh — Ta от содержания Re( $x_1$ ), Rh( $x_2$ ) и Ta( $x_3$ ), %. Исходные данные представлены ниже:

Номер опыта	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Экспериментальные данные $\delta$ , %	4,5	6,5	3	8	6	5	4	7	3	6,5	2,5	3	6	5,5

Варьирование факторов следующее: Re — 0,35 ( $\pm 0,1$ ) % ( $x_1$ ); Rh — 0,5 ( $\pm 0,2$ ) % ( $x_2$ ); Ta — 0,8 ( $\pm 0,5$ ) % ( $x_3$ ).

Общее количество опытов  $N = 17$ , из них опыты в центре плана  $n_0 = 3$ . Они же и будут являться параллельными опытами  $m$ , т. к. в других точках параллельных опытов нет. Значения  $\delta$  в центре плана: 2,5 и 3 %.

В ходе расчетов построена матрица планирования (табл. 4.4). Для получения нелинейной квадратичной модели матрица дополнена звездными точками и тремя опытами в центре плана. Величина звездного плеча рассчитывается по формуле (4.47),  $\alpha = 1,353\,13$  ( $\alpha^2 = 1,83095$ ).

Для того чтобы сделать матрицу ортогональной, введены столбцы переменных  $x_i'$ . В табл. 4.4 приведена матрица планирования с результатами промежуточных расчетов.



Таблица 4.4

Матрицы планирования и результаты промежуточных расчетов

ОП	$x_0$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$x_1x_2$	$x_1x_3$	$x_2x_3$	$x_1'$	$x_2'$	$x_3'$	$y_{э}, \%$	$y_{расч}$
1	1	1	1	1	1	1	1	0,314	0,314	0,314	4,5	4,57
2	1	-1	1	1	-1	-1	1	0,314	0,314	0,314	6,5	6,42
3	1	1	-1	1	-1	1	-1	0,314	0,314	0,314	3	2,82
4	1	-1	-1	1	1	-1	-1	0,314	0,314	0,314	8	8,17
5	1	1	1	-1	1	-1	-1	0,314	0,314	0,314	6	5,82
6	1	-1	1	-1	-1	1	-1	0,314	0,314	0,314	5	5,17
7	1	1	-1	-1	-1	-1	1	0,314	0,314	0,314	4	4,07
8	1	-1	-1	-1	1	1	1	0,314	0,314	0,314	7	6,92
9	1	1,353	0	0	0	0	0	1,14461	-0,686	-0,686	3	3,17
10	1	-1,353	0	0	0	0	0	1,14461	-0,686	-0,686	6,5	6,36
11	1	0	1,353	0	0	0	0	-0,686	1,1446	-0,686	2,5	2,8
12	1	0	-1,35	0	0	0	0	-0,686	1,1446	-0,686	3	2,8
13	1	0	0	1,353	0	0	0	-0,686	-0,686	1,1446	6	5,76
14	1	0	0	-1,35	0	0	0	-0,686	-0,686	1,1446	5,5	5,76
15	1	0	0	0	0	0	0	-0,686	-0,686	-0,686	2,5	2,8
16	1	0	0	0	0	0	0	-0,686	-0,686	-0,686	3	2,8
17	1	0	0	0	0	0	0	-0,686	-0,686	-0,686	3	2,8

По результатам семнадцати опытов матрицы планирования по формулам (4.51)–(4.52) рассчитаны коэффициенты регрессии, их дисперсии и среднеквадратичные ошибки.

Рассчитанные коэффициенты квадратичной модели:

$b_0'$	$b_0$	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_{12}$	$b_{13}$	$b_{23}$	$b_{11}$	$b_{22}$	$b_{33}$
4,647	2,799	-1,18	-0,06	0,058	0,875	-0,63	0	1,074	-0,02	1,62

Дисперсии коэффициентов квадратичной модели:

$S_{b_0}$	$S_{b_i}$	$S_{b_{ij}}$	$S_{b_{ii}}$
0,07	0,085	0,102	0,112

Доверительные интервалы для каждой группы коэффициентов:

$\Delta b_0$	$\Delta b_i$	$\Delta b_{ij}$	$\Delta b_{ii}$
1,426	0,364	0,439	0,480

Сравнение абсолютных значений рассчитанных коэффициентов с их доверительными интервалами показывает, что статистически значимыми можно признать  $b_0, b_1, b_{12}, b_{13}, b_{11}, b_{33}$ .

Уравнение модели

$$y = 2,799 - 1,178x_1 + 0,875x_{12} - 0,625x_{13} + 1,074x_1^2 + 1,620x_3^2.$$

Сводный коэффициент корреляции  $R = 0,9879$ .

По формуле (4.56) рассчитывается значение критерия Фишера и сравнивается с табличным:

$\alpha$	$F_{\text{табл}}$	$F_{\text{расч}}$	$F_{\text{табл}}/F_{\text{расч}}$
0,05	19,405	0,679	28,58

Модель адекватна для уровня значимости  $\alpha = 0,05$ .

Зависимость расчетных и экспериментальных значений относительного удлинения ( $y$ ) представлена на рис. 4.8.

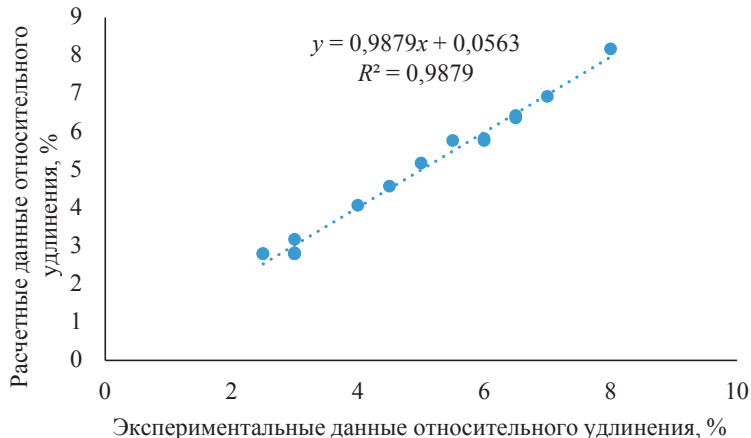


Рис. 4.8. Соотношение расчетных и экспериментальных значений относительного удлинения сплавов системы Re – Rh – Ta

## Библиографический список

---

1. Булинский А. В. Теория случайных процессов / А. В. Булинский, А. Н. Ширяев. Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2005. 408 с.
2. Вентцель Е. С. Теория вероятностей / Е. С. Вентцель. Москва : Академия, 2007. 576 с.
3. Гмурман В. Е. Теория вероятностей и математическая статистика : учебник для студентов вузов / В. Е. Гмурман. Москва : Высшее образование, 2008. 479 с.
4. Кингман Дж. Пуассоновские процессы : пер. с англ. / Дж. Кингман ; под ред. А. М. Вершика. Москва : МЦНМО, 2007. 136 с.
5. Крянев А. В. Математические методы обработки неопределенных данных / А. В. Крянев, Г. В. Лукин. Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2003. 216 с.
6. Савчук В. П. Обработка результатов измерений. Физическая лаборатория : учебное пособие / В. П. Савчук. Одесса : ОНПУ, 2002. Ч. 1. 54 с.
7. Тарасик В. П. Математическое моделирование технических систем : учебник для вузов / В. П. Тарасик. Минск : ДизайнПРО, 2004. 640 с.
8. Турчак Л. И. Основы численных методов : учебное пособие / Л. И. Турчак, П. В. Плотников. Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2003. 304 с.





*Учебное издание*

**Юдин Юрий Вячеславович**  
**Майсурадзе Михаил Васильевич**  
**Водолазский Федор Валерьевич**

**ОРГАНИЗАЦИЯ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ  
ЭКСПЕРИМЕНТА**

Редактор И. В. Меркурьева  
Верстка О. П. Игнатьевой

Подписано в печать 28.09.2018. Формат 60×84/16.  
Бумага офсетная. Цифровая печать. Усл. печ. л. 7,2.  
Уч.-изд. л. 5,52. Тираж 40 экз. Заказ 270

Издательство Уральского университета  
Редакционно-издательский отдел ИПЦ УрФУ  
620049, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 5  
Тел.: +7 (343) 375-48-25, 375-46-85, 374-19-41  
E-mail: rio@urfu.ru

Отпечатано в Издательско-полиграфическом центре УрФУ  
620083, Екатеринбург, ул. Тургенева, 4  
Тел.: +7 (343) 358-93-06, 350-58-20, 350-90-13  
Факс: +7 (343) 358-93-06  
<http://print.urfu.ru>





### **ЮДИН ЮРИЙ ВЯЧЕСЛАВОВИЧ**

Доктор технических наук (1999). Профессор кафедры термообработки и физики металлов (с 2000).

Основное направление научной и педагогической деятельности — изучение фазовых и структурных превращений в металлах и сплавах, численное моделирование технологий термической обработки крупногабаритных изделий, оборудование для закалочного охлаждения. Автор более 220 научных работ, в том числе 7 учебных пособий, 16 патентов и авторских свидетельств



### **МАЙСУРАДЗЕ МИХАИЛ ВАСИЛЬЕВИЧ**

Кандидат технических наук (2008). Доцент кафедры термообработки и физики металлов (с 2009). Лауреат Премии губернатора Свердловской области для молодых ученых (2015).

Основное направление научной и педагогической деятельности — изучение фазовых и структурных превращений в металлах и сплавах, численное моделирование процессов термической обработки, вопросы закалочного охлаждения, оборудование термических цехов. Автор более 100 научных работ, в том числе 2 учебных пособий, 1 патента



### **ВОДОЛАЗСКИЙ ФЕДОР ВАЛЕРЬЕВИЧ**

Кандидат технических наук (2010). Доцент кафедры термообработки и физики металлов (с 2011). Лауреат Премии губернатора Свердловской области для молодых ученых (2011).

Основное направление научной и педагогической деятельности — изучение фазовых, структурных и текстурных превращений в титановых сплавах, получение листовых полуфабрикатов из интерметаллидных сплавов на основе титана. Автор более 70 научных работ, в том числе 6 патентов